conference on ondensed Matter **Physics Society of Iran** 

Shahid Beheshti University Jan 25-26 , 2023 Tehran, Iran



آخرین مهلت ارسال مقاله : ۱۴۰۱/۸/۲۵ آخرین مهلت ثبت نام : ۱۴۰۱/۱۰/۱۴



### 💮 http://www.psi.ir/f/cmc16

#### كميته علمي:

- محمدحسین احسانی -دانشگاه سمنان
- حسین احمدوند دانشگاه صنعتی اصفهان
  - باقر اصلیبیکی دانشگاه تبریز
  - حسین چراغچی دانشگاه دامغان
  - میروحید حسینی دانشگاه زنجان
  - بابک زارع دانشگاه علم و صنعت ایران
    - علىاصغر شكرى دانشگاه الزهرا
    - على صادقى دانشگاه شهيد بهشتى
- سعید عابدین پور دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان
  - هادی عربی دانشگاه فردوسی مشهد
  - اصغر عسگری دانشگاه تبریز (دبیر کمیته)
    - محمود مرادی دانشگاه شیراز
    - رستم مرادیان دانشگاه رازی کرمانشاه
    - نعیمه ناصری دانشگاه صنعتی شریف
    - ترانه وظیفه شناس دانشگاه شهید بهشتی





🛞 نشانی کمیته علمی : تهران خیابان کارگر شمالی ، روبروی خیابان نوزدهم ، دانشکده فیزیک دانشگاه تهران ، ساختمان خیام ، انجمن فیزیک ایران 🖈 صندوق پستی : ۱۳۱۱-۱۵۸۷۵ 🕲 تلفن : ۲۱۶۶۹۰۵۲۴۷

كميته اجرايي:

- محبوبه بابایی
- وحيد باروق
- زهرا بيات
- سيدعلى حسيني اسفيدواجاني
  - على صادقي (دبير كميته)
    - امیر صادقینژاد
      - بهنام عزيزي
    - سپیدہ علی کاشانی
      - امین مالکی
      - آرزو مرادی
    - مریم هاتفی رودسری

🙎 نشانی کمیته اجرایی : تهران ، اوین ، میدان شهید شهریاری ، دانشگاه شهید بهشتی ، دانشکده فیزیک

- 🖈 صندوق یستی : ۱۹۸۳۹۶۹۴۱۱
  - ی تلفن : ۲۱۲۹۹۰۲۷۱۰
  - phys@sbu.ac.ir 🧟

a



# مقالهنامه

## شانزدهمین کنفرانس ماده چگال انجمن فیزیک ایران

دانشگاه شهید بهشتی

۵ و ۶ بهمنماه ۱۴۰۱

https://www.psi.ir/f/cmc16



سلام.

باسمه تعالى

خوشحالیم که شانزدهمین دوره کنفرانس ماده چگال انجمن فیزیک ایران هم مانند دورههای قبلی با استقبال پژوهشگران حوزه فیزیک ماده چگال کشور مواجه شد و با شرکت حدود ۲۰۰ نفر در روزهای چهارشنبه و پنجشنبه ۵ و ۶ بهمن ۱۴۰۱ در محل دانشکده فیزیک برگزار شد. برنامه علمی کنفرانس که با تلاش و زحمات اعضای محترم کمیته علمی کنفرانس پس از انجام داوری و انتخاب مقالات تنظیم شده بود در سه نیم روز اجرا شد. برنامه هر قسمت شامل یک سخنرانی عمومی، ۲ یا ۳ جلسه موازی برای سخنرانیهای تخصصی شرکت کنندگان و یک جلسه ارائه پوسترها بود. در مجموع ۲۴ مقاله به صورت شفاهی و ۷۴ مقاله به صورت پوستر ارائه شد. سه سخنرانی عمومی در چارچوب سه رهیافت رایج در فیزیک ماده چگال (تجربی نظری، محاسباتی) ارائه شد.

افتتاحیه این کنفرانس با توضیحات آقای دکتر علیرضا مشفق، عضو محترم هیات مدیره و نماینده انحمن فیزیک، شروع شد و با خوشآمدگویی دبیر کمیته اجرایی به حاضرین، تشکر از انجمن فیزیک ایران برای اعطای میزبانی این دوره کنفرانس به دانشکده فیزیک دانشگاه شهید بهشتی و تاکید بر نقش و تاثیر منحصر به فرد شرکت در همایشهای علمی دانشگاهی به شیوه حضوری در شکل گیری ارتباطات علمی بین محققیق و همکاریهای پژوهشی ادامه یافت. رئیس دانشگاه شهید بهشتی، آقای دکتر آقامیری، که خود از فارغ التحصیلان دانشکده فیزیک هستند از اهمیت و جایگاه فیزیک و به ویژه روش پرداختن به آموزش آن در دنیای مدرن سخن گفتند. دبیر کمیته علمی کنفرانس، آقای دکتر اصغر عسگری، آمار و شیوه داوری مقالات رسیده را شرح دادند و اشاره کردند که با عنایت به اینکه سخنرانیهای مجازی اکنون جزء برنامههای قابل اجرا در همه دادندگاههاست، کمیته اجرایی و شاخه ماده چگال انجمن تاکید داشتند که همه سخنرانیهای کنفرانس به مورت حضوری انجام شود که البته سخنرانان خارجی مورد نظر به همین دلیل نتوانستند دعوت ما را برای



پس از دو سال الزام به مجازی همایشها به دلیل محدودیتهای مرتبط با همه گیری بیماری کرونا، این کنفرانس جزء نخستین کنفرانسهای انجمن بود که به صورت کاملا حضوری بر گزار شد و لذا به رسم رایج کنفرانسهای علمی حضوری یک برنامه جانبی تفریحی به همراه داشت: بازدید از مجموعه فرهنگی تاریخی سعدآباد و موزههای آن با شرکت حدود ۷۵ نفر از شرکت کنندگان کنفرانس. عکسهای یادگاری گرفته شده در طول این کنفرانس دو روزه به همراه مقالهنامه کنفرانس که در حال مطالعه آن هستید از آدرس وبسایت کنفرانس کنفرانس دو روزه به همراه مقالهنامه کنفرانس که در حال مطالعه آن هستید از آدرس وبسایت

امیدواریم در آینده نزدیک باز هم دانشکده فیزیک دانشگاه شهید بهشتی میزبان همایشهای علمی با حضور دانشجویان و اعضای هیات علمی دانشگاههای کشور باشد.

علی صادقی دبیر کمیته اجرایی شانزدهمین کنفرانس ماده چگال انجمن فیزیک ایران ۱۴۰۱



سخنرانيهاي عمومي

**دکتر محمد خزائی** (دانشگاه تهران) عنوان سخنرانی: *" بررسی خواص الکترونی و ساختاری فازهای مکس و سیستمهای دوبعدی آنها (مکسین)* "

> دکتر جهانفر ابویی (دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان) عنوان سخنرانی: "برهم کنش توپولوژی و مغناطیس در عایقهای توپولوژیک"

**دکتر راحله محمدپور** (دانشگاه صنعتی شریف) عنوان سخنرانی: "ح*سگرهای خودمولد لمسی، گاز و نور برپایه نانوژنراتورهای تریبوالکتریک"* 

ررم. سی کے مقالهنامه شانزدهمین کنفرانس ماده چگال انجمن فیزیک ایران (دانشگاه شهید بهشتی، ۵ و ۶ بهمن ماه ۱۴۰۱)



### فهرست مقالات ارائه شده به صورت سخنرانی

صفحه	نویسندگان (ارائه دهنده)	عنوان مقاله	رديف
١	سارا آقتومان، میروحید حسینی	اثر پروانهای هافستدر و اثر هال کوانتومی در شبکهی مربعی یک پنجم خالی شده	١
۵	زينب بخشي پور، ميروحيد حسيني	ترابرد كوانتومي در مايع لاتينجر هليكال برهم كنشي با حضور ميدان زيمن	۲
0	فاطمه پشتيبان اصل، وحيد دادمهر، فاطمه شهباز	مشاهده و تحلیل اثر کندو در ابررسانای دمای بالا(2223) Zr/Cu BSCCO	
٦	طهراني، صدف وفاجو		
1 16		تاثیر دمای بستر بر ویژگی فیزیکی لایه های نازک اکسید مولیبدن تهیه شده به روش	¢
11	مجنبی عطایی، محمدرضا قدوی اسلام	افشانه گرمایی به منظور کاربرد در دیود	
١٩	مقداد یزدانیحمید، وحید مهرابی	وابستگی دمائی زاویه کر حالت ابررسانائی با تقارن برگشت زمان شکسته شده	۵
۲۳	مجید شیردل هاور، بابک زارع	جفتشدگی همدوس دو فرومغناطیس توسط فونون	۶
		اندازه گیری پهن شدگی دوپلری تابش نابودی پوزیترون بر روی نمونههای	v
1 Y	میناق قمری، مهدی قاسمی قرد	زیرکونیای آلاییده شده با عناصر فلزی	v v
۳۲	سمیه ناصری پورتکلو، علی ملایی محمد خان زاده	بررسی حسگری فلزات سنگین نقاط کوانتومی هسته/پوسته CdTe/CdS	٨
		بازتاب آندریو حساس به زاویه فرود و القاء ابررسانایی اسپین سه-تایی بر روی سطح	
79	مريضى صالحي	عايق توپولوژيک	۹
۴.	على محمدپور، جمال بروستاني، على سلطاني والا	مطالعه خواص اپتیکی یک شبهبلور فوتونی اوکتوناچی در حضور نانولایههای گرافن	١.
1010	مهرنوش فخرالدين، فاطمه شريعتمدار طهراني، مريم	سنتز سبز نانوساختار اکسید مس به کمک عصاره میخک و بررسی اثر کلسینه کردن بر	
٢٢	علیان نژادی	خواص ساختاری و اپتیکی آن	
۴۸	فاطمه میرمجربیان، سعید جهرمی، جهانفر ابویی	فاز کریستال پیوندی در مدل اسپینی ککوله-هایزنبرگ	١٢
۵۲	نيكان افصحي، نعيمه ناصري	میکروابرخازنهای چاپ شده تمام حالت جامدی بر پایه اکسید/هیدروکسید کبالت	١٣
	سيدوحيد حسيني، محمدرضا محمدي زاده، أندره	مطالعه اصول اولیه هیدروژن در مونواکسید تیتانیوم	
۵۶	 پوستنيكوف		14
_	الميرا نابي ميلاني، مينا پيرعلائي، داوود راعياني،	بررسي عملكرد سلولهاي خورشيدي آلي نيمهشفاف برپايه بلورفوتوني	
7.	اصغر عسگری		۱۵
54	پوریا ربیع بیگی، رستم مرادیان	تخت شدگی نوار ظرفیت در شبکه مربعی دو بعدی اندرکنشی- آلیاژی	18





صفحه	نویسندگان (ارائه دهنده)	عنوان مقاله	رديف
<b>C</b> 1	حامد عرب نصرت آبادی، سیدوحد حسینی، محدثه	ترکیبات پایدار هیدریدهای پالادیوم در فشار صفر با استفاده از دادهکاوی	
	عباس نژاد، محمدرضا محمدی زاده		1 4
VY		خواص الکترونی نانو نوارهای سیلیسن لبه دسته مبلی ناقص شده با پادنقطههای	
Ŷì	رطقا فارمني، شيداحمة عابي	کوانتومی خطی	
vc	المرابع مرجرا فروابه والمرابع	بررسی خواص ساختاری و فروالکتریک سرامیک	19
*/	هرجانه جعفری فسارتی، حسین احمدوند	(1-x)[PbFe <sub>0.5</sub> Nb <sub>0.5</sub> O <sub>3</sub> -PbTiO <sub>3</sub> ]/xCaZrO <sub>3</sub>	, ,
۸.	سعید عابدی، سیدجواد هاشمی فر، مهدی طریقی	پیشبینی گاف نواری نیمرساناها به روش DFT-1/2 و یادگیری ماشین	۲.
χ.	احمدپور		1.2
	زهرا موسیوند، داریوش سوری	اثر جایگزینی MoO3/V2O5 بر ویژگیهای نوری خطی و غیر خطی شیشههای	
71		اکسیدیTeO2-V2O5-MoO3	
٨٨	مسلم مير، سعيد عابدين پور	تأثیر برهمکنش الکترون–الکترون بر اثر هال غیر عادی و اثر هال اسپینی	۲۲
٩٣	فالمربع المربع المراجع والمراجع والمراجع	سنتز ساختارهای کریستالی تتراپاد ZnO به روش اکسیداسیون حرارتی پودر روی و	~~
	فاطعه رضائتي، پروير کاملي، مهدي ريجبر	تاثیر فرایند پیش آسیاب بر مورفولوژی	,,
٩٥		ساخت و بررسی ویژگیهای ساختاری و دیالکتریکی ترکیب چندفروئی	46
V	قاطمه بوالحيري، مرجانه جعفری، حسين احمدوند	KNiPO4	11





### فهرست مقالات ارائه شده به صورت پوستر

صفحه	نويسندگان (ارائه دهنده)	عنوان مقاله	رديف
١	شراره حسن پور کاشانی، جمال بروستانی، بهار	خواص الکتریکی و مغناطیسی نانونوار زیگزاگ آنتیمونن در حضور ناخالصی آهن در	\ \
1	مشگین قلم	موقعیت های مختلف	1
1.4	شيرين نامجو، پيتر پوشنيگ	خواص اپتیکی آلیاژها با پهنای گاف کمInAsxSb1-x	۲
		(x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1)	
١٠٨	تهمينه خادمي، طيبه مولاروى	مطالعه خواص ساختاری و الکترونی پروسکایت دوبعدی هیبریدی بدون سرب	٣
		PEA)2Gel <sub>4</sub> ) با استفاده از نظریه تابعی چگالی	
١١٢	رویا مجیدی	ساختار و خواص الکترونی نانولولههای BeN₄: مطالعه نظریه تابعی چگالی	۴
\\Y	فاطمه عرب بیگی، حمیده شاکری پور، نوید	ساخت و بررسی خواص لایه نازک ابررسانای YBa2Cu3O7-5 ساخته شده به روش	
	نجات بخش، محمدحسين مكاريان	لايه نشاني چرخشي	ω
17.	زهرا کرم بیگی، جلیل ناجی، خدیجه قاسمیان	شناسایی تک مولکول گاز بر پایه گرافن تحت تنش	۶
174	نيما خادميان، مينا آسيابي	تاثیر فرآیند تولید بر چقرمگی سرامیک آلومینا	٧
١٢٨	زينب رشيديان، نسا احمدزاده	ترابرد قابل کنترل با پتانسیل متناوب در گرافین سه لایه با ساختار برنلABA	٨
144	محمدرضا باسعادت	مطالعه تاثیر تنش و اندازه دانه بر رفتار خزش آلیاژ Zr-1%Nb از طریق شبیه سازی	٩
		اتمى	
140	الميرا برزه كار، محمدحسين حكمت شعار،	ساختار نواری نانونوار تکلایهی P2C با ساختار لبههای مختلف در ساختار پنتاگرافن با	١.
117	پريناز حسين پور، قاسم رضايي، جعفر جليليان	استفاده از نظریه تابعی چگالی	1.
14.	طيبه عباسي	بررسی خواص اپتیکی بروفن در حضور ناخالصی کروم	١١
1.67	على الخيگاني، رضا قنبري، شعبان قرباني، هادي	سنتز و مشخصه یابی و رونشانی اکسید نیکل منگنز (NiMnO <sub>3</sub> ) بر روی رشتههای	14
110	عربى	ای-مسی	
149	پريناز حسين پور، مونا أقاجاني مرسار	تأثیر اندازه نقطه کوانتومی استوانهای شکل گالیم آرسنیک بر روی خواص ترمودینامیکی	١٣
105	سعد سلطانی، رضا قنبری، شعبان قربانی، هادی	سنتز و مشخصه یابی کامپوزیت منگنز مولیبدنیوم اکساید (MnMoO₄) تهیه شده بر	16
101	عربى	روی فوم نیکل	11
۱۵۸	محمد امینی، پیمان صاحب سرا	ترابرد الكتروني در سلول خورشيدي نانوساختار نقطه كوانتومي لانتانيومواناديوماكسايد	۱۵
164	سمانه قنبری کاشان، نرگس نیکوفرد	نوسانات وزیکولهای لیپیدی در اثر افزایش دما با استفاده از شبیهسازی دینامیک	16
171		مولکولی درشتدانه	17
188	سیاوش فتحی، باقر اصلی بیکی	بررسی تاثیر آلایش نیکل برروی ویژگیهای ساختاری ونوری نانومیلههای اکسیدروی	١٧
	مقداد یزدانی حمید، وحید مهرابی	محاسبه ی خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی ترکیب Sr2RuO4 با استفاده از	
1		تقریب LSDA در حضور برهمکنش اسپین-مدار	1

### \_\_\_\_\_, ' رویع.\_\_\_\_ \_\_\_\_\_ بمنوندیس\_\_\_\_\_\_



صفحه	نويسندگان (ارائه دهنده)	عنوان مقاله	
176	عرفانه مقدسی نژاد، داریوش سوری، علیرضا	تعیین گاف انرژی، انرژی اورباخ، ضریب شکست و ثابت دی الکتریک نانوبلورهای	١٩
	خضری پور	ZnSe:Cu سنتز شده در محیط آبی	
١٧٨	نرگس نیکوفرد، حامد احمدی ترکمان <u>ی</u>	آیا پوشش کرونا ویروس ها با بالا رفتن دما از هم می پاشد؟	۲.
١٨٢	اکبر خلج، علی اصغر شکری، نادیا سلامی	تاثیر برهمکنش الکترون _فونون روی ترابرد الکتریکی در نانوساختارهای نامتجانس	51
	محمد رنجبر تکلیمی، مریم عظیم زاده ایرانی	بررسی برهمکنش دامین CTLD4 گیرنده مانوز (CD206) با واکسن نانوذرات فریتین –	~~
		RBD ویروس SARS-CoV-2	• • •
١٩١	شیرین سبک دست، نادیا سلامی	بررسی ویژگی های جذب و الکترونیکی گازها بر روی نانوشیت بروفن	۲۳
۱۹۵	محبوبه شهري ناصري	تزریق اسپین در ساختارهای سه لایه ای با اعمال میدان های الکتریکی و مغناطیسی	74
۱۹۹	شیرین نامجو، سید جواد هاشمی فر	ساختار نواری و ویژگیهای توپولوژیکی ترکیبهای MoP و MoN	۲۵
۲۰۳	فاطمه بوربور	پمپ جریانهای اسپینی بر پایه نانو نوارهای گرافینی زیگزاگ	78
۲. ۸	فرزاد فرهمندزاده، مهدی ملایی، سمیرا صالحی	سنتز و مشخصه یابی نانوکامپزیت rGO/Fe3O4/ZnSe و بررسی کاربرد آن برای	<b>T</b> V
1.1		تصیفه آب از آلاینده های رنگی	1 4
717	زهرا ابراهیمی پور	بررسی خواص الکترونی و ترابردی سامانه- الکترود/پلیمر- پلی استیلن/الکترود	
710	سحر ضیاالملکی، باقر اصلی بیکی، محمود	سنتز و بررسی ویژگی های ساختاری و نوری نمونه g-C3N4 و نانو کامپوزیت -g	٢٩
1 17	زارعى	C3N4/Fe3O4	1.
۲۲۰	رویا شکرانی حویق، حسین محمودی چناری	سنتز الیاف کربن به روش الکتروریسی و بررسی خواص ساختاری و مغناطیسی آن	٣٠
446	رضا محمدزاده، صبا موسيوند	بررسی تغییر ولتاژ بر خواص نانوذرات اکسید آلومینیوم –آهن سنتز شده به روش	٣١
111		الكترواكسيداسيون	11
222	مريم هاشمي، آسيه السادات كاظمى شيخ شباني	رشد عایق بلوری KBr و بررسی پتانسیل الکتروستاتیک موضعی بر روی گرافن	٣٢
۲۳۲	سمیرا بهادیوندچگینی، محبوبه شهریناصری	تأثیرات سد الکتریکیومغناطیسی بر ترابرد اسپینی در مدل نیمرسانای نامتجانس چندلایه	٣٣
440	زہرا کی احمدی، محمد رضا زمانی میمیان،	ساخت لایه های نازک نانوکامپوزیتی NiCo2O4 تهیه شده به روش کندوپاش همزمان	<i>~~</i>
117	سمانه محمودي قاشقاي	تحت گاز واکنشی اکسیژن و بررسی اثر فتوکاتالیستی آن	• • •
747	داود راعیانیِ، المیرا عنابی میلانی، اصغر عسگری	بهینهسازی عملکرد سلول خورشیدی غیرفولرنی PM6:Y6 با عملیات سطحی یووی-	٣٨
		اوزون	1 0
74V	فاطمه سليماني، پيمان صاحبسرا، اكرم	تأثیرات اندازه، طولموج و زاویهی بازتاب در گرمادرمانی توسط نانوذرهی طلا،	٣6
, , , ,	پورشريف	مبتنىبر تشديد پلاسمون سطحي	17
701	سحر متقیان، مژگان نجفی	ساختوبررسي خواص مغناطيسي آرايههاي نانوسيم آهن-كبالت-اينديوم الكتروانباشت	<b>~</b> V
101		ه در قالبهای AAO: اثر زاویه بین میدان مغناطیسی اعمالی و محور نانوسیم	
۲۵۵	بشری کیانی صدر، علی اصغر شکری، بهرام	مطالعه خواص اپتیکی GaN و AlN و مقایسه نتایج تقریب TB-mBJ با GGA-PBE	٣.
	عابدي روان		17





۲۹۹         سیا مراسانای ایکو آلاید شده با تاولراه کرین و تاونردات اکسیا، امن 1500 مینا جولایی فروشانی، حیده شاگری پور         ۲۹           ۲۹۰         بورسی خوامی (اکثر فراند) شدگافت آب         ۲۹۰           ۲۹۰         نو ترکانالیست در واکش شگافت آب           ۳۹۰         افر ترصی خوامی (اکثر فراند) فراندی تاکیزانه) گرافتی با لمحای زیگراک نامقارت در           ۳۹۰         شد ترکی تر تو شرک کالتوارهای گرافتی با لمحای زیگراک نامقارت در           ۳۹۰         مد ترکی تر ترسیز از ساختارهای نامتجانس جانی مولیدن دی           ۲۹۰           مدوم تندگی کو آخرمی در تر تاریز سند را بخشنداد در حضور توسانات           مدوم تندگی کو آخرمی در تر تاریز سند را بخشنداد در حضور توسانات           مدوم تندگی کو آخرمی در تاریز تارید مداخلیسی در تارید مدوندی در مدور توسانات           مینا در منظیر در مداخلیسی در تارید مداخلیسی در تارید در حضور توسانات           مینا در مدخلیسیز تارید مداخلیسی در تارید در تعمیر تر تارید در حضور توسانات           مینا در بیناسین تارید در تعمیر تارید در حضور توسانات           مینا در مدخلیسیز تارید در تعمیر تارید در تعمیر تارید در تعمیر تواری تارید در تارید در تارید در تارید تریز توارد)           مینا تارید در تاری تارید در تارید تارید در تعمید در توری تارید در تارید تارید تارید در تارید تارید در تارید تارید در تارید تارید تارید در تارید تارید تارید در تاری تارید در تارید تارید تارید در تارید تارید تارید تارید تارید در تارید تارید تارید در تارید تارید تارید در تارید تارید تارید در تارید تارید تاید تارید در تارید تارید تارید تارید تارید تارید تارید	رديف	عنوان مقاله	نویسندگان (ارائه دهنده)	صفحه	
۲۳         بردسی عوامی اکثرونی و نوری KNa2Sn3S8 و KNa2Sn3S8 معازان         زیر احجی احمدی، سید شهاب الدین نقوی           ۲۴         تو تو کاتالیت در واکنش شکافت آب         ۲۴           ۲۴         تو تو کاتالیت در واکنش شکافت آب           ۳         ۲۴         تو تو کاتالیت در واکنش شکافت آب           ۳         ۲۴         تو تو کامی در والیکتریکی ناتر فرافرادهای ثامجانس جانی مولیدن دی           ۳         مدلسازی تر تریستر اثر میشان بر ناترساختارهای نامجانس جانی مولیدن دی           ۳         مدر تیک کی کاتوری           ۳         و تو مشخصه یایی ناتو کاموزیت معناطیسی کاتجانس جانی مولیدن دی           البر و تشخصه یایی ناتو کاموزیت معاظر می در تعریز باز جفت شده دو خو در نیایات           میدوری در معالی در تریزی در معایزی در معایزی در معایزی دی ناطمه ایران نواد           Tre و مشخصه یایی ناتو کاموزیت معاظر نواردی و چگالی حالات شبکه مربعی دو بعدی .           ۲۰۰           البروزیت معافرین این تو کی می نادن یو در معاور نو سالات           میدور نو منافی ایز کاموزیت معافریز دو دی کانی مرا تو در دی کی می در نادی دی دو بعدی ایروزی دو معافری دو دو نامی در معافی در دو در معافری دو در معافری دو در در داری در دو در دو در در در در دو در معافی دو داری در دو در	۳۹	مطالعه ابررسانای ایبکو آلاییده شده با نانولوله کربنی و نانوذرات اکسیدآهن Fe2O3	مینا جولایی فروشانی، حمیده شاکری پور	۲۵۹	
۱۰         فوتوكائالیت در واكن شكاف آب         ۱۰           ۲۰۰         فوتوكائالیت در واكن شكاف آب         ۲۰۰           ۲۰۰         فوتوكائالیت در واكن شكاف آب         ۲۰۰           ۲۰۰         مغور برهمكن الكترون الكترون         ۲۰۰           ۲۰۰         مغابری مرابع منتی بر تاتوساخارهای تامخانس جانی مولیدان دی         ۲۰۰           ۲۰۰         مغران مغر شكری         ۲۰۰           ۲۰۰         درهماتیدگی كوانتومی در یك سیستم دو كوبیت بار جفت شاه در نوسانات         ۲۰۰           ۲۰۰         میزان جهادی، حمیله سیدیوی، طاهه ایران نژاد         ۲۰۰           ۲۰۰	~~~	بررسی خواص الکترونی و نوری K2Na2Sn3S8 و Rb3NaSn3Se8به عنوان	زهرا حاجي احمدي، سيد شهاب الدين نقوي	4 C W	
۲۹         از نقص در خواص تروالکتریکی ناتونرادهای گرافتی با لیمای زیگزاک نامتقازن در         انطبه مظهری موسوی، روح اله فرقدان           ۲۹         مغرور برهمکنش الکترون الکترری ناتونرادهای گرافتی با لیمای برای مولیدان دی         ناتوب سلامی، علی اصغر شکری           ۲۹         مغرور برهمکنش الکترون الکترری بریادهای برای میتی بر ناتو صاحتارهای نامتجانس جالی مولیدان دی         ناتوب سلامی، علی اصغر شکری           ۲۹         درمم تثیر گی گرانتومی در یک سیستم در گوربیت بار جفتشانه در حضور توسانات         سید.محمد حسینی، میلاد نوروزی، جمیله           ۲۹۲           میتو د مشخصیای ناتوکامیوزیت مغناطیسی Kife204/Fe304           میتو د مشخصیای ناتوکامیوزیت مغناطیسی Kife204/Fe304           میتو د مشخصیای ناتوکامیوزیت مغناطیسی Kife204/Fe304           میتو در یک سیستم در گهریند کار سی در بعدی از میدادی. جمیله سیدیزدی، فاطمه ابرافیمی           ۲۹۲           میتو در الکامیوزیت مغناطیسی Kife204/Fe304           ۲۹۸           میتو در تانو نوادی در تغیر فاز شرای معردی در بعدی	15	فوتوكاتاليست در واكنش شكافت آب		191	
11       حضور برهمکش الکترون-الکترون       11         ۲۲       مغدادان تراییتور اثر میدانی میتی بر تاتوساختارهای نامتجانی مولیدن دی       نادیا سلامی، علی اصغر شکری       ۲۲         ۲۲       مولقاید در معلج پیرمته       ۲۲       مولقاید در معلج پیرمته       ۲۲         ۲۲       دردم تریدگی کوانتومی دو یک میستم دو گیوییتر بار جفت شده در حضور نومانات       میدمحمد حسینی، میلاد نوروزی، جمیله       ۲۲         ۲۰۲       کوانتومی دو یک میستم دو گیوییتر بار جفت شده در حضور نومانات       میدمحمد حسینی، میلاد نوروزی، جمیله       ۲۲         منتز و مشخصه بایی ناتو کامپوزیت مغناطیسی KP204/F8304       فرناز جمادی، <u>حمویه میدیردی، قاطمه ایرانیزده</u> ۲۸         منتز و مشخصه بایی ناتو کامپوزیت مغناطیسی KP204/F8304       فرناز جمادی، <u>حمویه میدروزینی میدیردی</u> ۲۸         منتور میدانی بیدن سایتی برساختار تواری و چکالی حالات شبکه مربعی دو بعدی <u>پرزیا زیم بیکی</u> ، رستم مرادیان       ۲۸         اندان نادر میدانی تعیین شدت یوندهای هدروزی نانو       مرحالی نواین نواین (در (الاستوم)-سیلیکا       ۲۸         اندوزیا نیم نور (لاستوم)-سیلیکا       ۲۸         اندو مشخصه بایی ناتو کامپوزیت میای نوای تعیین شدت یوندهای هدروزی نانو       مرحالیانی (در معلوه به سیدردی)، نوایان         میتونی زیر زیری نوایا نوایا       ۲۸         اندوزین میاند نوایان ایزی (در معلوی)       ۲۸         اندوزین نوایا نوایای معنوری نایا (در شرزی فرایا (در فرایان	×5.1	اثر نقص در خواص ترموالکتریکی نانونوارهای گرافنی با لبههای زیگزاگ نامتقارن در	فاطمه مظهري موسوي، روح اله فرقدان	Yel	
۲۳         مدلسازی ترانزیستور اثر میدانی میشی بر نانوساختارهای نامتجانس جانی مولیدن دی روفاید در سطح پیرمته         ۲۳           ۲۳         درهم تنیدگی کولتومی در یک میستم دو کیوییت بار جفت شده در حضور نوسانات کولتومی         میدجده حسینی، میلاد نوروزی، جمیله           ۲۳           کولتومی در یک میستم دو کیوییت بار جفت شده در حضور نوسانات میدیزدی، فاطمه ایران نژاد «           ۲۳           کولتومی کی کولتومی در یک میستردی، فاطمه ایران نژاد «           ۲۸           کولتومی اینه برساختار نواری و چگالی حالات شبکه مربعی دوبعدی پروز ربیع بیگی، دستم مرادیان           ۲۸           کولتومی و پتاسیل ناخالعی در تغییر فاز شبکه مربعی دوبعدی پروز ربیع بیگی، دستم مرادیان           ۲۸           کولتو و پتاسیل ناخالعی در تغییر فاز شبکه مربعی دوبعدی پروز ربیع بیگی، دستم مرادیان           ۲۸           کولت میگر کولتی و پتاسیل ناخالعی در تغییر فاز شبکه مربعی دوبعدی پروز ربیع بیگی، دستم مرادیان           ۲۹           کولتوری تعییروزگی مرادی مرادی دوبعدی پروز ربیا بیع بیگی، دستم مرادیان           کولتوری میلیز ناخالعی در تغییروزگی کولتوری تعیی دوبعدی پروزی ربیع بیگی، درستم مرادیان           کولتوری میان کولی دوبولی بیع بیگر کولی دوبعدی پرولی دوبولی دوبولی دوبولیم دوبولین           ۲۹           کولتوری دوبولی دوبولی دوبولی دوبولی دوبولیم دوبولی دوبولیم دوبوی دوبولیم دوبولیم د	51	حضور برهمكنش الكترون-الكترون		197	
۱۱         موافابلد در سطح پیوسته         ۱۱           ۲۲         دوم منیدگی کوانتومی در یک سیستم دو کیوبیت بار جفت شده در حضور نوسانات         سیدیزدی، قاطه ایران نژاد           ۲۳           کوانتومی           ۱۳           کوانتومی           ۱۳           کوانتومی           ۱۳           کوانتومی           ۱۳           ۱۳           کوانتومی           ۱۳           ۱۳           ۱۳           ۱۳           ۲۹           ۲۹           ۲۹           کوانتومی دینداند پرماندونی و پتاسیل ناخالصی در تغییر فاز شبکه مربعی دو بعدی بردی پرویا ریخ بیگی، دستم مرادیان           ۲۹           کوانتومی در پادیندوم، ندادان، درویا محیدی           ۲۹           کوانتومی در پادیندوم، ندادان، درماندونی، جمیله درمایندوم، درمادی درماندوم، درماندوم، درماندان، درماندوم، درمادیاندوم، درماندوم، درماندوم، درمادیاندوم، درماندوم، درما	~~~	مدلسازی ترانزیستور اثر میدانی مبتنی بر نانوساختارهای نامتجانس جانبی مولیبدن دی	نادیا سلامی، علی اصغر شکری	~\/w	
${}^{\rm PT}$ ودوم تبیدگی کوانتومی در یک سیستم دو کیوبیت بار جفت شده در حضور نوسانات کوانتومیسیدیودی، فاطمه ایران نژاد سیدیودی، فاطمه ایران نژاد منتز و مشخصه بایی نانو کهپوزیت مغاطیسی NiFe204/Fe304 فرناز جمالی، جمیله سیدیودی، فاطمه ایراه نژاد الال ${}^{\rm PT}$ ${}^{\rm PT}$ ستز و مشخصه بایی نانو کهپوزیت مغاطیسی NiFe204/Fe304 فرناز جمالی، جمیله سیدیودی، فاطمه ایراه نژاد الال محل بودهاند می خیصی، عایر ضا ${}^{\rm PT}$ ${}^{\rm PT}$ الرائد هم بستگی بین سایتی بر ساختاز نواری و چگانی حالات شبکه مربعی دو بعدی المپرویا دیم بیگی، دستم مرادیان ${}^{\rm PT}$ ${}^{\rm PT}$ رقبات می نواند می خیصی، عایر ضا ${}^{\rm PT}$ ${}^{\rm PT}$ رقبات می نواند می خیسی از حالی دو تغییل از محمد و بعدی الم الندان در ویا مجیدی ${}^{\rm PT}$ ${}^{\rm PT}$ رقبات می در اعادی در تغییر فاز شبکه مربعی دو بعدی 	11	سولفايد در سطح پيوسته		1 1 1	
$11^{11}$ کواتومی       سیدرودی، فاطمه ایران تژاد       سیدرودی، فاطمه ایران تژاد $11^{11}$ مستر و مشخصه یایی ناتو کامپوزیت مغاطیسی NiFe204/Fe304       فرنژ جمادی، جمیله سیدیزدی، فاطمه ایراهیمی $11^{11}$ مستر و مشخصه یایی ناتو کامپوزیت مغاطیسی NiFe204/Fe304       فرنژ جمادی، جمیله سیدیزدی، فاطمه ایراهیمی $11^{11}$ الزارت هم بستگی بین سایتی برساختار نواری و جگالی حالات شبکه مربعی دوبعدی       پوریا ربیع بیگی، رستم مرادیان $11^{11}$ الزار دشتی       الزار دستم مرادیان       المال $11^{11}$ ستر و مشخصه یایی ناتو کامپرزیت مالی در نیز فاز شبکه مربعی دوبعدی       پوریا ربیع بیگی، رستم مرادیان       المال $11^{11}$ ستر و مشخصه یایی ناتو کامپرزیت مالی در نیز شبکاه مربعی دوبعدی       پوریا ربیع بیگی، رستم مرادیان       الماله $11^{11}$ ستر و مشخصه یایی ناتو کامپرزیت مالی در نیز فارهای دیتوندهای هدروزی ناتو       موریند نالی ای پورتا زیا مرابع مرادیان       الماله $11^{11}$ ستر و مشخصه یایی ناتو کامپرزیت مالی فران می در ناتو نازه ای سیدرون یا نود       الماله       الماله $11^{11}$ ستر و مشخصه یایی ناتو کامپرزیت مالی مرابعی کاری       مورین میاد مرابعی کی دوبت می در ناتو نازه مرداری کاری بیدا مردوندی می مرابعی در نابع مردوندی مرابع مردوندی نابع مردوندی مرابعی مردوندی دوبت می در ناتو نوارهای زیگراگ گرافی ناتو مردوندی به مردوندی می مرابعی در دوبت مردوندی مردوبت دوبت مردوندی دوبت مردوبت کاری می مردو مردوندی مردوندی مرداندیزی مردوبت کاری می مردوبت دوبت مردوبت کاری مردوندی دوبت مردوبت کاری مردوندی مردوبت	ĸw	درهم تنیدگی کوانتومی در یک سیستم دو کیوبیتِ بار ِجفتشده در حضور نوسانات	سیدمحمد حسینی، میلاد نوروزی، جمیله	~~~~	
NiFe204/Fe304فرناز جمادی، جمیله سیدیزدی، فاطمه ابراهیمی $Yf$ تر شری ابوالفضل پورهاشمی خبیصی، علبرضا $Yf$ تارای $Yf$ <	, , ,	كوانتومى	سیدیزدی، فاطمه ایران نژاد	1 4 4	
FFتوزنگی، ایوالفضل پورهاشمی خیصی، علیرضا $TAT$ $B7$ آثرات هم بستگی بین سایتی بر ساختار نواری و چگالی حالات شبکه مربعی دوبعدیپوریا رہیم بیگی، رستم مرادیان $A7$ $B7$ آثار درکنشی $F8$ $F8$ رقابت الدرکنشی کولنی و پتانسیل ناخالصی در تغییر فاز شبکه مربعی دو بعدیپوریا رہیم بیگی، رستم مرادیان $A7$ $F8$ رقابت الدرکنشی کولنی و پتانسیل ناخالصی در تغییر فاز شبکه مربعی دو بعدیپوریا رہیم بیگی، رستم مرادیان $A7$ $F8$ مرضیه ندافان، رویا مجیدیمرضیه ندافان، رویا مجیدی $F8$ $F7$ مستز و مشخصه یابی نانوکامپوزیت های فرین شدت پیوندهای هدروژنی نانومرضیه ندافان، رویا مجیدی $F8$ $F8$ مستز و مشخصه یابی نانوکامپوزیت های فریز دهای فریزی کالی المروزیمرضیه ندافان، رویا مجیدی $F8$ $F8$ مستز و مشخصه یابی نانوکامپوزیت های فریزی می کانیا $F8$ $F8$ مستز و مشخصه یابی نانوکامپوزیت های فریزی کالی گرافتی نظریه تابعی چکالیمرضیه ندافان، رویا مجیدی، فاطمه ابراهیمی $F8مستز و مشخصه یابی نانوکرهای فریزاک گرافتی نظریه تابعی چگالیمیوسف مهای زود، میلاد مالکی مقدمF8مستز و مشخصه یابی نانوکرهای زیگراک گرافتی: نظریه تابعی چگالیمیوسف مهای فریزه، میلاد مالکی مقدمF9مستز و مشخصه یابی نانوکره یانوزاده مکتیت و بررسی و یژگی های ساختاریآرات نقوا مولی فریز مالی مورسی معامی المان مولی المان مولی مولیمی مرضیه مرضیه المانی و رود مواسی مولی و مولیمی مولیمیF9میوانوله های گاماگرافین درجداره با روش شیه مولکولیمحضری سعد آبادیF9مولی و مغاطبه المالی و رود موالی و موالکتریکی موزگی مولاد مالی و رود مولیمی مو$		سنتز و مشخصهیابی نانوکامپوزیت مغناطیسی NiFe2O4/Fe3O4	فرناز جمادی، جمیله سیدیزدی، فاطمه ابراهیمی		
کارآمدکارآمد $83$ الزارت هم بستگی بین سایتی بر سایتی اورادی و چگالی حالات شبکه مربعی دوبعدییوریا زیبع بیگی، رستم مرادیان $84$ النارکنشیالنارکنشی $87$ رقابت اندرکنشی کولنی و پتانسیل ناخالصی در تغییر فاز شبکه مربعی دو بعدییوریا زیبع بیگی، رستم مرادیان $87$ رقابت اندرکنشی کولنی و پتانسیل ناخالصی در تغییر فاز شبکه مربعی دو بعدییوریا زیبع بیگی، رستم مرادیان $87$ مرضیه ندافان، زویا مجیدییوریا زیبع بیگی، رستم مرادیان $87$ ستتر و مشخصه بایی نانو کامپوزیت های فرین شدت پیوندهای هدروژنی نانومرضیه ندافان، زویا مجیدی $87$ آرو و مخالفی یورتان نرم (الاستومر)-سیلیکامرفیه ندافان، زویا مجیدی $87$ ستتر و مشخصه بایی نانو کامپوزیت های فرین محالی می از میناند.آرو معاذالهی، جمیله سیدیزدی، فاطمه ابراهیمی $87$ آرو و مخالفی یورتان نرم (الاستومر)-سیلیکاآرو معاذالهی، جمیله سیدیزدی، فاطمه ابراهیمی $87$ ستتر و مشخصه بایی نانو کردهای فریخان گرانه تابعی چگالییوسف مهدی زاده، جمیله سیدیزدی، فاطمه ابراهیمی $87$ ستتر و مشخصه بایی نانو کردهای زیگراک گرافتی: نظریه تابعی چگالییوسف مهدی زاده، جمیله سیدیزدی، فاطمه ابراهیمی $87$ آرات نقص و میدان الکتریکی در نانو نوادهای زیگراک گرافتی: نظریه تابعی چگالیمیه استگی، روح اله فوقدان $87$ آرات نقص و میدان الکتریکی در نانو نوادهای سیاست و مرحلی موردی، مرضیهبرای سیکی، مونوی موردی، مرضیه $87$ آرات نقص و میدان الکتریکی در نانو نوادهای زیگراک گرافتی: نظریه تابعی چگالیمیدا آبری موردی، مرضیه $87$ آرات نقص و میدان الکتری نوادهای میلیس نو مانطیه، مولکولیمیدا آبری روی خواس زیگرای $87$ آرات نقص و موالکتریکی نانو نوادهای سیلین نو مانطیسی مولکولیمعدا قابیمی روی	44		تزنگى، ابوالفضل پورھاشمىخبيصى، َعليرضا	۲۸۱	
$ \frac{1}{10} \frac{1}{10}$			کارآمد		
$10^{-1}$ الدركنثى $10^{-1}$ $10^{-1}$ $77^{-1}$ رقابت اندركنثى كولنى و پتانسيل ناخالصى در تغيير فاز شبكه مربعى دو بعدىپوريا ربيع بيگى، رستم مراديان $77^{-1}$ $77^{-1}$ استفاده از طيف سنجى مادون قرمز براى تعيين شدت پيوندهاى هيدروژنى نانومرب ندافان، رويا مجيدى $79^{-1}$ $79^{-1}$ کامپوزيت پلى يورتان نرم (الاستومر)-سيليكا $79^{-1}$ $79^{-1}$ سنتز و مشخصه يابى نانو كامپوزيت هاى فريت منگنز/كسيدآهن $79^{-1}$ $79^{-1}$ سنتز و مشخصه يابى نانو كامپوزيت هاى فريت منگنز/كسيدآهن $79^{-1}$ $79^{-1}$ سنتز و مشخصه يابى نانو كره هاى مرجانى Nico204يوسف مهدى زاده، جميله سيديزدى، فاطمه ابراهيمى $79^{-1}$ سنتز و مشخصه يابى نانو كره هاى مرجانى Nico204يوسف مهدى زاده، جميله سيديزدى، فاطمه ابراهيمى $79^{-1}$ سنتز و مشخصه يابى نانو كره هاى مرجانى Nico204يوسف مهدى زاده، جميله سيديزدى، فاطمه ابراهيمى $79^{-1}$ يوسف مهدى زاده، جميله سيديزدى، فاطمه ابراهيمى $79^{-1}$ $79^{-1}$ يوسف مهدى زاده، جميله سيديزدى، مواحيه $79^{-1}$ $79^{-1}$ يوسف مهدى زاده، جميله سيديزدى، مواحيه $79^{-1}$ $79^{-1}$ يوسف مهدى زين ميد زاده، جميله سيديزدى، موضيه $79^{-1}$ $79^{-1}$ يوسف مهدى زيادى ميد ميد موليدى موليدى $79^{-1}$ $79^{-1}$ يوسف مهدى زيادى $79^{-1}$ $79^{-1}$ $79^{-1}$ يوسفي موليدى $79^{-1}$ $79^{-1}$ $79^{-1}$ <	¥A	اثرات هم بستگی بین سایتی برساختار نواری و چگالی حالات شبکه مربعی دوبعدی	پوریا ربیع بیگی، رستم مرادیان	<b>7</b> A A	
97رقابت اندرکنش کولنی و پتانسیل ناخالصی در تغییر فاز شبکه مربعی دو بعدیپوریا ربع بیگی، رستم مرادیان۲۸۹۲۹۳استفاده از طیف سنجی مادون قرمز برای تعیین شدت پیوندهای هیدروژنی نانومرضیه ندافان، رویا مجیدی۲۹۳۲۹۳۲۹۳کامپوزیت پلی یورتان نرم (الاستومر)-سیلیکا۳۹آزرو معاذالهی، جمیله سیدیزدی، فاطمه ابراهیمی۳۹سنتز و مشخصه یابی نانو کامپوزیت های فریت منگنز /اکسیدآهن۳۹۲۹۹۳۰آزرو معاذالهی، جمیله سیدیزدی، فاطمه ابراهیمی۳۹۳۰ابرامیمی تزنگیابرامیمی تزنگی، میلاه سیدیزدی، فاطمه ابراهیمی۳۰ابرای می تریکی، میلاه مالکی مقدم۵ابرای تقص و میدان الکتریکی در نانو نوارهای زیگزاگ گرافنی: نظریه تابعی چگالیسیز مشخصه یابی نانو کره های مرجانی NiCo2O4۲۰۰ابرای می تریکی، میلاه میلی میلی میلی میلی میلی میلی میزدیکی، فاطمه۲۰۰۲۰۰ان توزاده، جمیله سیدیزدی، فاطمه۲۰۰ان توزاده مای کامار گرافی زیگزاگ گرافنی: نظریه تابعی چگالیسیز میلی توزی میلی سیلی میلی توزی می سینا از توزی میلی ایندونی۲۰۰مریز میلی توزی میلی سیلی توزی می زیلی میلی میلی مرفیندونی، میلی میلی میلی توزی میلی میلی میلی میلی میلی میلی میلی می	10	اندرکنشی		176	
$\gamma$ استفاده از طیفسنجی مادون قرمز برای تعیین شدت پیوندهای هیدروژنی نانومرضیه ندافان، رویا مجیدیستز و منجصه یابی ناتو کره (الاستومر)-سیلیکا)ستز و منجصه یابی ناتو کره (الاستومر)-سیلیکا)ستز و مشخصه یابی ناتو کره های فریت منگنز /اکسیدآهنمرحف الزوج معاذالهی، جمیله سیدیزدی، فاطمه ابراهیمی۲۹۳ $\kappa$ ستز و مشخصه یابی ناتو کره های فریت منگنز /اکسیدآهنآزرو معاذالهی، جمیله سیدیزدی، فاطمه ابراهیمی۲۹۹ $\kappa$ ستز و مشخصه یابی ناتو کره های فریت منگنز /اکسیدآهن۲۹۹آزرو معاذالهی، جمیله سیدیزدی، فاطمه ابراهیمی $\kappa$ ستز و مشخصه یابی ناتو کره های مرجانی NiCo204یوسف مهدی زاده، جمیله سیدیزدی، فاطمه $\kappa$ ستز و مشخصه یابی ناتو کره های مرجانی Nico204ابراهیمی تزنگی، میلاد مالکی مقدم $\kappa$ اثرات نقص و میدان الکتریکی در ناتو نوارهای زیگزاگ گرافنی: نظریه تابعی چگالیسمیه استکی، روح اله فوقدان $\kappa$ اثر عوامل قلیایی بر ستز شیمیایی نانوذرات مگنتیت و بررسی ویژگی های ساختاری،سوح سلیمانی فر، رضا سرحدی، مرضیه $\kappa$ اثر عوامل قلیایی بر ستز شیمیایی نانوذرات مگنتیت و بررسی ویژگی های ساختاری،سوح سلیمانی فر، رضا سرحدی، مرضیه $\kappa$ اثر عوامل قلیایی بر ستز شیمیایی نانوذرات مگنتیت و بررسی ویژگی های ساختاری،سوح سلیمانی فر، رضا سرحدی، مرضیه $\kappa$ اثر عوامل قلیایی بر ستز شیمیایی نانوذرات مگنتیت و بررسی ویژگی های ساختاری،سوح سلیمانی فر، رضا سرحدی، مرضیه (لاستوم) $\kappa$ اثر عوامل قلیایی بر ستز وی میزی میندی می وی تانو محیایی مواندی مورین معروبی می وی موندیسوح سلیمانی ور، مراحدی مرضیه $\kappa$ اثر عوامی مرایط آزماینگاهی برون می مون مولی می مینا ازدیانی، سید احمد کتابی، رضا کارمی۳۳ $\kappa$ سو فیدآهن تهیه شده به روش الکترونی ترکی پناسیمی نانوساختارهایسور فرزین صدر، صبا موسیوند $\kappa$	49	رقابت اندرکنش کولنی و پتانسیل ناخالصی در تغییر فاز شبکه مربعی دو بعدی	پوریا ربیع بیگی، رستم مرادیان	۲۸۹	
(1)کامپوزیت پلی یورتان نرم (الاستومر)-سیلیکا $(1)$ $(2)$ کامپوزیت پلی یورتان نرم (الاستومر)-سیلیکا $(2)$	۴V	استفاده از طیفسنجی مادون قرمز برای تعیین شدت پیوندهای هیدروژنی نانو	مرضیه ندافان، رویا مجیدی	۲۹۳	
4ستز و مشخصه یابی نانو کامپوزیت های فریت منگنز / کسیدآهنآورزو معاذالهی، جمیله سیدیزدی، فاطمه ابراهیمی $797$ $6$ ستز و مشخصه یابی نانو کره های مرجانی NiCo204یوسف مهدی زاده، جمیله سیدیزدی، فاطمه ابراهیمی $797$ $6$ ستز و مشخصه یابی نانو کره های مرجانی NiCo204یوسف مهدی زاده، جمیله سیدیزدی، فاطمه ابراهیمی $797$ $6$ اثرات نقص و میدان الکتریکی در نانو نوارهای زیگزاگ گرافتی: نظریه تابعی چگالیسمیه استکی، روح اله فرقدان $797$ $6$ اثر عوامل قلیایی بر سنتز شیمیایی نانوذرات مگتیت و بررسی ویژگی های ساختاری،سمیه استکی، روح اله فرقدان $797$ $710$ اثر عوامل قلیایی بر سنتز شیمیایی نانوذرات مگتیت و بررسی ویژگی های ساختاری،سمیر سلیمانی فر، رضا سرحدی، مرضیه $710$ اثر عوامل قلیایی بر سنتز شیمیایی نانوذرات مگتیت و بررسی ویژگی های ساختاری،سمیر سلیمانی فر، رضا سرحدی، مرضیه $710$ اثر عوامل قلیایی بر سنتز شیمیایی نانوذرات مگتیت و بررسی ویژگی های ساختاری،سمیر سیمانی فر، رضا سرحدی، مرضیه $710$ اثر عوامل قلیایی بر سنتز شیمیایی نانوذرات مگتیت و بررسی ویژگی های ساختاری، $797$ $710$ سور سید رسی اثر شرایط آدهای شگاهی بر ویژگی می سیان یا دینانی، سید احمد کتابی، رضا کلامی $797$ $711$ سرسی اثر شرایط آزمایندگاهی بر ویژگی کانو نوارهای سیلیس نابه دسته مبلی $797$ سوز فیز محدر، مصادی موسیوند $797$ $797$ سولهیدآهای به شده به رویز گرمای می ویژ گی ماناردی ای رضا کلامی $797$ مور سیاز شرایط آزمایندای موالی موالی مولیای مولی موالی می مینا رو مانایسی مولی مولی مولی مولی مولی مولی مولی مول	1 ¥	كامپوزيت پلى يورتان نرم (الاستومر)-سيليكا		1 (1	
111تزنگی $111$ $111$ تزنگی $111$ $111$ $1112$	<i>ا</i>	سنتز و مشخصهیابی نانوکامپوزیتهای فریت منگنز /اکسیدآهن	آرزو معاذالهی، جمیله سیدیزدی، فاطمه ابراهیمی	rav	
PAImage: product stateImage: product stateImage: product stateImage: product stateImage: product state6.البراهيمى تزنگى، ميلاد مالكى مقدم٣٠٩6.الثرات نقص و ميدان الكتريكى در نانو نوارهاى زيگزاگ گرافنى: نظريه تابعى چگالىسميه استكى، روح اله فرقدان٣٠٩6.الثر عوامل قليايى بر سنتز شيميايى نانوذرات مگنتيت و بررسى ويژگى هاى ساختارى،سميه استكى، روح اله فرقدان٣٠٩6.الثر عوامل قليايى بر سنتز شيميايى نانوذرات مگنتيت و بررسى ويژگى هاى ساختارى،سميه استكى، روح اله فرقدان٣٠٩7.1الثر عوامل قليايى بر سنتز شيميايى نانوذرات مگنتيت و بررسى ويژگى هاى ساختارى،سمير تونكى، ميلاد مالكى، مرضيه٣٠٩7.1الثر عوامل قليايى بر سنتز شيميايى نانوذرات مگنتيت و بررسى ويژگى هاى ساختارى،سمير آبادى٣٠٩7.1الثر تارش بر روى خواص ترموالكتريكى نانو نوارهاى سيليس لبه دسته مبلىحضرتى سعد آبادى٣٠٩7.1الثر تارش بر روى خواص ترموالكتريكى نانو نوارهاى سيليسن لبه دسته مبلىماد آغاجرى، جمال داودى٣٠٩7.1الثر تارش بر روى خواص ترموالكتريكى نانو نوارهاى سيليسن لبه دسته مبلىماد آغاجرى، جمال داودى٣٠٩7.1سريس الثر شرايط آزمايشگاهى بر ويژگىهاى ساختارى و مغناطيسى نانوساختارهاىسمير فرزين صدر، صبا موسيوند٣٠٩7.1سريس الثر شرايط آزمايشگاهى بر ويژگىهاى ساختارى و مغناطيسى نانوساختارهاىسمير فرزين صدر، صبا موسيوند٣٠٩7.1سريس الثر شرايط آزمايشگاهى بر ويژگىهاى ساختارى و مغناطيسى نانوساختارهاىسمير فرزين صدر، صبا موسيوند٣٠٩7.1سولفيدامن تهي شده به روش الكتروكى يساختارى و مغناطيسى نانوساختارهاىسمير فرزين صدر، صبا موسيوند٣٠٩7.1سولفيدارى ساختارى و			تزنگی	1.11	
11ابراهیمی تزنگی، میلاد مالکی مقدم $11$ $0.0$ اثرات نقص و میدان الکتریکی در نانو نوارهای زیگزاگ گرافنی: نظریه تابعی چگالیسمیه استکی، روح اله فرقدان $9.%$ $0.1$ اثر عوامل قلیایی بر سنتز شیمیایی نانوذرات مگنتیت و بررسی ویژگی های ساختاری،سحر سلیمانی فر، رضا سرحدی، مرضیه $0.1$ اثر عوامل قلیایی بر سنتز شیمیایی نانوذرات مگنتیت و بررسی ویژگی های ساختاری،سحر سلیمانی فر، رضا سرحدی، مرضیه $0.1$ اثر عوامل قلیایی بر سنتز شیمیایی نانوذرات مگنتیت و بررسی ویژگی های ساختاری،سحر سلیمانی فر، رضا سرحدی، مرضیه $0.1$ اثر عوامل قلیایی بر سنتز شیمیایی نانوذرات مگنتیت و بررسی ویژگی های ساختاری،سحر سلیمانی فر، رضا سرحدی، مرضیه $0.1$ اثر عوامل قلیایی بر سنتز شیمیایی نانوذرات مگنتیت و بررسی ویژگی های ساختاری،سحر سلیمانی فر، رضا سرحدی، مرضیه $0.1$ اثر عوامل قلیایی بر سنتز شیمیایی نانوذرات مگنتیت و بررسی ویژگی های ساختاری،سحر سلیمانی فر، رضا سرحدی، مرضیه $0.1$ اثر عوامل قلیایی بر سنتز شیمایی زی و معاطیسی آن هاسعد آبادی $0.1$ اثر تابش بر روی خواص ترموالکتریکی نانو نوارهای سیلیسن لبه دسته مبلیمبینا اردیانی، سید احمد کتابی، رضا کلامی $0.1$ اثر تابش بر روی خواص ترموالکتریکی نانو نوارهای سیلیسن لبه دسته مبلیمبینا اردیانی، سید احمد کتابی، رضا کلامی $0.1$ سحر فرزین صدر، صدر محمد محمدی اینداسیونسحر فرزین صدر، صدر محمدی محمد محمدی $0.1$ سحر فرزین صدر، مرابله آزمایشگاهی بر ویژگیهای ساختاری و مغناطیسی نانوساختارهایسحر فرزین صدر، صدا موسیوند $0.1$ سحر فرزین صدر، صدر محمدهدی محمدهدی محمدهدی محمدهدی جامعی، مریمسحر فرزین صدر، مریم $0.1$ سحر فرزین صدر، مریم سیندسحر فرزین صدر، مریم $0.1$ سحر فرزین صدر، محمدهدی محمدهدی مح	¥64	سنتز و مشخصهیابی نانوکرههای مرجانی NiCo2O4	یوسف مهدی زاده، جمیله سیدیزدی، فاطمه	٣.١	
0.0اثرات نقص و میدان الکتریکی در نانو نوارهای زیگزاگ گرافنی: نظریه تابعی چگالیسمیه استکی، روح اله فرقدان $7.7$ $0.1$ اثر عوامل قلیایی بر سنتز شیمیایی نانوذرات مگنتیت و بررسی ویژگی های ساختاری،سحر سلیمانی فر، رضا سرحدی، مرضیه $0.1$ اثر عوامل قلیایی بر سنتز شیمیایی نانوذرات مگنتیت و بررسی ویژگی های ساختاری،سحر سلیمانی فر، رضا سرحدی، مرضیه $0.1$ ایتیکی و مغناطیسی آن هاسحر سلیمانی فر، رضا سرحدی، مرضیه $0.1$ مخر تی سعد آبادی $0.1$ خوب نانولوله های گاماگرافاین دوجداره با روش شبیه سازی دینامیک مولکولیحامد آغاجری، جمال داودی $0.1$ اثر تابش بر روی خواص تر موالکتریکی نانو نوارهای سیلیسن لبه دسته مبلیمبینا اردیانی، سید احمد کتابی، رضا کلامی $0.1$ اثر تابش بر روی خواص تر موالکتریکی نانو نوارهای سیلیسن لبه دسته مبلیمبینا اردیانی، سید احمد کتابی، رضا کلامی $0.1$ سحر فرزین صدر، مرضیهبرسی اثر شرایط آزمایشگاهی بر ویژگیهای ساختاری و مغناطیسی نانوساختارهایمبینا اردیانی، سید احمد کتابی، رضا کلامی $0.1$ سحر فرزین صدر، مرابی می مینا اردیانی، سید احمد کتابی، مرابی کلامی۲.1 $0.1$ سحر فرزین صدر، مرابی ایراسیونسحر فرزین صدر، مرابی می می اردیا $0.1$ سحر فرزین صدر، مرابی می می مینا اردیانی، سید احمد کتابی، رضا کلامی۲.1 $0.1$ سحر فرزین صدر، مرابی می مرابی می	, ,		ابراهیمی تزنگی، میلاد مالکی مقدم	11	
	۵۰	اثرات نقص و میدان الکتریکی در نانو نوارهای زیگزاگ گرافنی: نظریه تابعی چگالی	سمیه استکی، روح اله فرقدان	808	
$10^{10}$ اپتیکی و مغناطیسی آن ها $-40^{10}$ $-40^{10}$ $-40^{10}$ $-10^{10}$ $-40^{10}$ $-10^{10}$ $00^{10}$ $-40^{10}$ $-40^{10}$ $-40^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $00^{10}$ $-40^{10}$ $-40^{10}$ $-40^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $00^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $00^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $00^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $00^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $00^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $00^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $00^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $00^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $00^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $00^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $00^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $-10^{10}$ $00^{10}$ $-10$	~~~	اثر عوامل قلیایی بر سنتز شیمیایی نانوذرات مگنتیت و بررسی ویژگی های ساختاری،	سحر سلیمانی فرٍ، رضا سرحدی، مرضیه	w. 1	
000 $000$ <t< td=""><td>ωι</td><td>اپتیکی و مغناطیسی آن ها</td><td>حضرتی سعد آبادی</td><td>1.1</td></t<>	ωι	اپتیکی و مغناطیسی آن ها	حضرتی سعد آبادی	1.1	
۵۳       اثر تابش بر روی خواص ترموالکتریکی نانو نوارهای سیلیسن لبه دسته مبلی       مبینا اردیانی، سید احمد کتابی، رضا کلامی       ۳۲۰         ۸۹       بررسی اثر شرایط آزمایشگاهی بر ویژگیهای ساختاری و مغناطیسی نانوساختارهای       سحر فرزین صدر، صبا موسیوند         ۹۵       سولفیدآهن تهیه شده به روش الکتروکریستالیزاسیون         ۹۵       بررسی خواص ساختاری و الکترونی ترکیب پتاسیم سولفید در فاز مکعبی(بلند–روی)         ۹۵       مداله صالحی، محمدمهدی جامعی، مریم         ۹۵       عزیزی	۵۲	ذوب نانولوله های گاماگرافاین دوجداره با روش شبیه سازی دینامیک مولکولی	حامد أغاجري، جمال داودي	۳۱۲	
۸۴       بررسی اثر شرایط آزمایشگاهی بر ویژگیهای ساختاری و مغناطیسی نانوساختارهای       سحر فرزین صدر، صبا موسیوند         ۵۴       سولفیدآهن تهیه شده به روش الکتروکریستالیزاسیون         ۸۹       بررسی خواص ساختاری و الکترونی ترکیب پتاسیم سولفید در فاز مکعبی(بلند–روی)         ۵۵       عزیزی	۵۳	اثر تابش بر روی خواص ترموالکتریکی نانو نوارهای سیلیسن لبه دسته مبلی	مبینا اردیانی، سید احمد کتابی، رضا کلامی	818	
<ul> <li><sup>10</sup> سولفیدآهن تهیه شده به روش الکتروکریستالیزاسیون</li> <li><sup>11</sup> سولفیدآهن تهیه شده به روش الکترونی ترکیب پتاسیم سولفید در فاز مکعبی(بلند–روی)</li> <li><sup>10</sup> حمداله صالحی، محمدمهدی جامعی، مریم</li> <li><sup>11</sup> مریس</li> </ul>	٨۴	بررسی اثر شرایط آزمایشگاهی بر ویژگیهای ساختاری و مغناطیسی نانوساختارهای	سحر فرزين صدر، صبا موسيوند	WY .	
بررسی خواص ساختاری و الکترونی ترکیب پتاسیم سولفید در فاز مکعبی(بلند-روی) حمداله صالحی، محمدمهدی جامعی، مریم ۵۵ مزیزی	ω٢	سولفيداًهن تهيه شده به روش الكتروكريستاليزاسيون		11.	
۵۵ عزیزی		بررسی خواص ساختاری و الکترونی ترکیب پتاسیم سولفید در فاز مکعبی(بلند-روی)	حمداله صالحی، محمدمهدی جامعی، مریم	~~~~	
	۵۵		عزيزى	117	





صفحه	نویسندگان (ارائه دهنده)	عنوان مقاله	رديف
۳۲۸	حمداله صالحی، فاطمه خادمیان، مریم عزیزی	بررسی ویژگی ساختاری و الکترونی ترکیبات ایتریم کرومیت و لانتانیم کرومیت در فاز مکعبی	۵۶
۳۳۲	عرفانه مقدسی نژاد، داریوش سوری، علیرضا خضری پور	مطالعه پذیرفتاری نوری غیر خطی مرتبه سوم ( <b>χ(3</b> ))وعامل فلزیشدگی نانوذرات سلنید روی آلاییده به مس رشد یافته توسط تابش مایکرویو	۵۷
۳۳۶	سیما رحیمی، خدیجه قاسمیان، جلیل ناجی	بررسی تونلزنی در شبکه T3	۵۸
84.	مطالعه خواریحان نجاتی پور، مهرداد دادستانی	طیفهای اتلاف انرژی الکترون نزدیک ساختار لبههای K و L سولفور در کالکوپیریت AgGaS2	۵۹
844	ریحانه عبدی، روح الله فرقدان 	خواص ترابردی عایقهای توپولوژیکی مغناطیسی در حضور اثر وارپینگ شش ضلعی و نور قطبیده دایروی	۶.
٣۴٩	سید امیر سلیمی ارشد، سید سعید سیوف جهرمی	فاز های بلور پیوندی در مدل هایزنبرگ پادفرومغناطیس بر روی نوار کاگومه	۶۱
۳۵۳	اسما اسکندرلی، محمد خزائی، محمدرضا محمدیزادہ	ساخت و مشخصه یابی صفحات دو بعدیTi2C	87
۳۵۷	شكوفه سيفي علمي، مريم مالمير	مطالعهی ذخیره سازی هیدروژن در الکترود Cu- Fe/MWCNT	
۳۶۰	حامد سلطانی، حامد بحیرائی، شهناز قاسمی	تأثیر زمان الکتروانباشت بر ظرفیت ویژه الکترودهای ابرخازن MnO2	
854	مسعود مجیدیان سرمزده، رشید ولی	بررسی و مقایسه ویژگیهای نوری دو فاز متداول بتا و گاما نیمرسانای InSe با سه فاز جدید دلتا، امگا و فی: محاسبات اصول اولیه	۶۵
٣۶٨	مهدیه محمودی، پرویز کاملی	ے۔ بررسی نقش اکسیدگرافن برروی خواص حسگری حسگر گاز ہیدروژن مبتنی بر فریت کبالت	<i><b>۶</b>۶</i>
۳۷۲	محمد خندابی، حسین احمدوند	چگالی ذخیره انرژی بزرگ در فروالکتریکهای بدون سرب -BiFeO3-BaTiO3 KNbO3 با پایداری حرارتی فوقالعاده	۶۷
۳۷۶	حمداله صالحي، زينب فرد عليدادي	بررسی خواص ساختاری NiMnSb بەكمك نظریهٔ تابعی چگالی	۶٨
۳۸۰	فاطمه محرمی نژاد، سمانه قنبری کاشانی، نرگس نیکوفرد	مطالعه تطبیقی بستهبندی پلیمر نیمه انعطافپذیر به داخل نانوکره با استفاده از شبیهسازی دینامیک مولکولی	۶٩
۳۸۴	جواد خوش پیام، حسین احمدوند	اثر هال غیرعادی در آلیاژ پادفرومغناطیس Mn3Sn	٧٠
۳۸۷	محبوبه امیری فدردی، طیبه مولاروی	بررسی ابتدا به ساکن جذب مولکول CO روی سطح استانن به منظور کاربرد نانوحسگر گازی	۲۱
۳۹۱	محبوبه امیری فدردی، طیبه مولاروی	شبیه سازی جذب مولکول آرسین( AsH3 ) روی سطح نانوروبان استانن	۲۲
۳۹۵	حامد سلطانی، حامد بحیرائی، شهناز قاسمی	تاثیر MnO2 بر ویژگیهای ساختاری و ظرفیت ویژه g-C3N4 لایهنشانی شده بر فوم نیکل	۷۳
۳۹۹	<u>سندس موالیزادہ،</u> امیر علیاکبری	مطالعه ابتدا به ساکن پایداری مکانیکی و ویژگیهای کشسانی انبوه هالوژنهای نقره AgX (X=Br and I)	٧۴





### اثر پروانهای هافستدر و اثر هال کوانتومی در شبکهی مربعی یک پنجم خالی شده آقتومان ، سارا' ؛ حسینی، میروحید'

. دانشکده فیزیک دانشگاه زنجان ، زنجان، بلوار دانشگاه، دانشگاه زنجان

چکیدہ

ما طیف انرژی و اثر هال کوانتومی را در شبکهی مربعی یک پنجم خالی شده در حضور میدان مغناطیسی یکنواخت مطالعه کردیم. هامیلتونی شبکه را در تغریب تنگ بست با در نظر گرفتن پرش همسایگی اول و دوم بدست آوردیم و با محاسبهی طیف پروانهای هافستدر متوجه از بین رفتن تقارن در ساختار نواری در حضور پرش همسایگی دوم شدیم. همچنین دیاگرام فاز و ونیر دیاگرام را در بعضی از مقادیر پرش محاسبه کردیم. **واژه های کلیدی:** اثر پروانهای هافستدر، فاز پایرلز، شار مغناطیسی، نمودار ونیر

### Hofstadter butterfly and the quantum Hall effect in 1/5-depleted square lattice

#### Aghtooman, Sara<sup>1</sup>; Hosseini, Mirvahid<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, University of Zanjan, Zanjan,

#### Abstract

We study the energy spectrum and quantum Hall effect of the 1/5-depleted square lattice in uniform magnetic field. We consider the tight-binding model with nearest- neighbour and next-nearest-neighbour hopping in this system. We show that the symmetry in Hofstadter butterfly spectra with increasing next-nearest-neighbour hopping remove. We also calculate diagram phase and wannier diagram in some values of hopping. **Keywords:** Hofstadter butterfly effect, peierls phase, magnetic flux, wannier diagram

PACS No.

این پدیده ی فیزیکی با محاسبه انرژی بر حسب شار مغناطیسی گذرنده از هر سطح بسته طیف خود متشابه ای را در گاف نمایش می دهد. بعلاوه اگر رسانندگی هال را بر حسب شار مغناطیسی و چگالی فرمیون ها در هر سلول واحد محاسبه کنیم، کانتورهایی با رسانندگی هال یکسان روی خطوط مستقیم ظاهر می شود که راه حل های معادله دوفونتین هستند و به دیاگرام فان لاندائو معروف می باشند (۳). شبکه ی مربعی یک پنجم خالی شده از ساختارهای بکار رفته در مواد واقعی است که دارای نظم مغناطیسی می باشد. همین امر ما را تشویق به محاسبه ی ساختار نواری شبکه در حضور میدان مغناطیسی نمود. در این مقاله ما طیف فرکتال هافستدر را در این شبکه برای چند مقدار پرش همسایگی دوم محاسبه کردیم.

#### مقدمه

سامانههای الکترونیکی در حضور میدان مغناطیسی عمودی در فیزیک ماده چگال از اهمیت ویژهای برخوردار هستند. این سامانههای فیزیکی منجر به پیدایش اثرات فیزیکی متنوع همانند اثر هال کوانتومی صحیح(۱) و یا اثر پروانهای هافستدر خود متشابه که ساختار ترازهای انرژی الکترونهای بلاخ را بر حسب شار مغناطیسی توصیف میکند، می شوند.

امر پروانهای هافستدر نفش مهمی را در نئوری امر هال کوانتومی صحیح و اعداد کوانتومی توپولوژیکی بازی میکند و از تقابل دو طول دورهی تناوب شبکه و طول مغناطیسی در سامانههای شبکه بوجود میآید(۲).



همچنین با محاسبهی نمودارهای دیاگرام فاز و دیاگرام لاندائو در حضور هاپینگ همسایگی دوم متوجه تغییرات جالب توجه نوارهای انرژی شدیم. بطویکه این تغییرات در چگالی حالتهای الکترونی و پهنای نوارها و گاف انرژی ظاهر شد.

مدل

ما یک مدل شبکهی مربعی یک پنجم خالی شده روی یک صفحهی دو بعدی در نظر میگیریم. طبق شکل ۱ این شبکه شامل دو سطح بسته بشکل مربع کوچک و بزرگ است و سلول واحد سازندهی شبکه، یک مربع کوچک با چهار اتم می باشد.



شکل ۱ : هندسه شبکه مربعی یک پنجم خالی شده. مربعها با خط چین سلول واحد با چهار زیر شبکه را نشان میدهند و هاپینگ همسایگی اول و دوم به

ترتیب با <sub>1</sub> و <sub>2</sub> نشان داده شده است. با در نظر گرفتن پتانسیل برداری بصورت ((, A = (0, Bx و A

مربع بزرگ با یک شار مغناطیسی یکنواخت عمود بر سطح شبکه روبرو است که باعث میشود هاپینگ الکترون با یک فاز در طول سایتهای شبکه همراه باشد. هامیلتونی تنگ-بست با در نظر گرفتن هاپینگ همسایگی اول و دوم بصورت زیر است.

$$H = \sum_{m,n} \left[ t_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \alpha c_{m,n,i}^{\dagger} c_{m,n,j} + t_2 \sum_{\langle \langle i,j \rangle \rangle} \beta c_{m,n,i}^{\dagger} c_{m,n,j} + H c \right]$$
$$\alpha = e^{i\theta m}, \ \beta = e^{i\theta(m + \frac{1}{4})}$$

که  $c_{m,n,i}^{\dagger} = c_{m,n,i}^{\dagger}$  عملگر خلق (فنا ) برای یک الکترون در سایت  $i_{m,n,i}$  می سایت iام و سلول واحد (m,n)ام است.  $t_2 \cdot t_1 \cdot t_2$  بترتیب هاپینگ همسایگی اول و دوم را در راستای ضلع و قطر مربع کوچک نشان می دهند. فازهای پایرلز با  $\alpha$ ،  $\beta$  نشان داده شده است که در آنها

$$\begin{split} \Phi_{_{0}} &= -2\pi \frac{\Phi}{2\Phi_{_{0}}} \\ \Phi_{_{0}} &= -2\pi \frac{\Phi}{2\Phi_{_{0}}} \\ \partial_{q} &= 2\Phi_{_{0}} \\$$

$$t = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{\overline{q}} dk_{x} \int_{0}^{2\pi} dk_{y} \left[ \partial_{k_{x}} A_{k_{y}} - \partial_{k_{y}} A_{k_{x}} \right]$$
$$A_{k_{y}} = i \left\langle \phi(k_{x}, k_{y}) \middle| \partial_{k_{y}} \middle| \phi(k_{x}, k_{y}) \right\rangle \qquad (1)$$

که  $A_{k_y}$  و  $\phi(k_x, k_y)$  در رابطه ۲ اتصال بری و حالت بلاخ پر شده هستند. به ازای هر مقدار شار f عدد چرن برای هر گاف انرژی بدست می آید. شمارهی گاف و مقدار چرن با حل معادلهی دوفونتین که در رابطه ۳ آمده است، بدست می آید.

$$\frac{r}{q} = t_r f + s_r \quad (r)$$

ما ساختار نواری مدل مورد نظر را در حضور میدان مغناطیسی عمود بر صفحه در حضور پرش همسایگی اول و دوم محاسبه کرو

طيف انرژي



ڎٳۺڲٳڋ ڛۑؾۑ

> که در شکل ۲ نشان داده شده است. شکل سمت چپ طیف هافستدر در مدل معرفی شده را در حضور پرش همسایه اول و در غیاب پرش همسایگی دوم نشان می دهد. همانطور که در نمودار مشخص است، در غیاب پرش همسایگی دوم گاف انرژی در ساختار نواری ظاهر و طیف فرکتال به سه نوار تقسیم شده است. همچنین تقارنها نسبت به انرژی صفر و مقدار شار  $\frac{1}{2} = f$  در نوارهای انرژی حفظ شدهاند. در صورتیکه با ظاهر شدن پرش همسایگی دوم که در شکل سمت راست با دو رنگ مشکی و قرمز مشخص است، تقارن ساختار نواری از بین می ود. همچنین ساختار فرکتال به دو بخش تقسیم می شود و گاف بزرگی در ساختار ظاهر می شود. نمودار مشکی در این شکل مربوط به مقدار پرش  $5.0 = _1$  و نمودار قرمز پرش  $1 = _2$  را نشان می دهد. همانطور که مشخص است، با افزایش پرش همسایگی دوم پهنای

ما رسانندگی هال را برای این دو مقدار پرش همسایگی دوم محاسبه کردیم و همچنین با حل معادله دوفونتین نمودار فان دیاگرام لاندائو را بدست آوردیم. شکل۳ نمودار رسانندگی هال و دیاگرام ونیر را در مقدار پرش همسایگی دوم 1.5 = t\_2 نشان میدهد.



شکل۳ : نمودار سمت راست ساختار نواری طیف هافستدر در مقدار هاپینگ t<sub>2</sub> = 0.5 نشان میدهد که رنگ هر گاف مشخص کنندهی عدد چرن است. نمودار سمت چپ دیاگرام ونیر را در همین مقدار هاپینگ برای چند مقدار چرن نامبر نشان میدهد.

نمودار سمت راست مربوط به دیاگرام فاز است که مقادیر عدد چرن از کمترین مقدار که کمتر از ۱۱٦- است و تا بیشترین مقدار که بیشتر از ۱٤۵ است را نشان میدهد. رنگ سبز مربوط به

بیشترین مقدارعدد چرن است و رنگ نارنجی کمترین مقدار عدد چرن را نشان میدهد. رنگ سفید و مشکی در این نمودار مربوط به عدد چرن صفر میباشد. نمودار سمت چپ مربوط به دیاگرام ونیر در این مقدار هاپینگ است که برای مقادیر عدد چرن ۲۰ – تا ۲۰ محاسبه شده است. با حل معادله دوفونتین نمودار در این مقدار پرش بدست آمد. همانطور که در نمودار دیده میشود چگالی ترازهای الکترونی در قسمت پایین نمودار بیشتر است و به همان نسبت پراکندگی اعداد چرن مختلف در قسمت بالایی دیده میشود. همچنین اعداد چرن با مقدار یکسان روی یک خط با شیب یکسان همانطور که انتظار میرود، دیده میشوند. برای مقدار پرش همسایگی دوم  $1 = _1$  نمودارهای شکل ٤ را بدست آوردیم.



شکل٤ : نمودار سمت راست ساختار نواری طیف هافستدر در مقدار پرش t<sub>2</sub> = 1 نشان میدهد که رنگ هر گاف مشخص کنندهی عدد چرن است. نمودار سمت چپ دیاگرام ونیر را در همین مقدار پرش برای چند مقدار عدد چرن نشان میدهد.

در این شکل، نمودار سمت راست دیاگرام فاز را برای اعداد چرن کمتر از ۹۰- تا بیشتر از ۷۲ نشان میدهد. بیشترین و کمترین مقدار عدد چرن مربوط به گافهای کوچک است. رنگ سبز مربوط به مقدار عدد چرن منفی و رنگ آبی عدد چرن مثبت را نشان میدهد. در این نمودار هم عدد چرن صفر با رنگ سفید و مشکی نشان داده شده است. در این شکل نمودار سمت چپ دیاگرام ونیر را برای اعداد چرن ۲۰- تا ۲۰ با اشکال و رنگهای مختلف نشان میدهد. با محاسبه این نمودار متوجه افزایش چگالی ترازهای الکترونی نسبت به نمودار ونیر شکل می مویم. در این نمودار هم چگالی در قسمت پایین نمودار نسبت به بخش بالایی نمودار بیشتر است و پراکندگی اعداد چرن متفاوت در قسمت بالایی دیده می شود.  $\frac{1}{2} = f$  در نمودار میباشد. با زیاد شدن مقدار پرش همسایه دوم گاف بین نوارها افزایش یافته و پهنای آنها کاهش مییابد. با محاسبه یعد چرن مربوط به هر گاف در دو مقدار پرش همسایه دوم متوجه تغییرات مقادیر عدد چرن شدیم. بطوریکه با افزایش پرش همسایه دوم و بیشتر شدن تبهگنی ترازهای الکترونی قدر مطلق عدد چرن کاهش یافت. که نشاندهنده کاهش رسانندگی هال ترازهای الکترونی زیر انرژی فرمی میباشد. با حل معادله دوفونتین و محاسبه ی نمودار دیاگرام ونیر همانطور که انتطار میرفت، افزایش چگالی ترازهای الکترونی در بخش پایین نمودار با افزایش پرش همسایگی دوم دیده شد. و همچنین پراکندگی

[1] K. v. Klitzing G. Dorda and M. Pepper, "New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance"; *Phys. Rev. Lett.* 45, (1980) 494.

[Y] D. R. Hofstadter, "Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields"; *Phys. Rev. B* 14, (1976) 2239.

[r] G. H. Wannier, "A Result Not Dependent on Rationality for Bloch Electrons in a Magnetic Field"; *Phys. Status Solidi B* 88, (1978) 757.

[\*] T. Fukui, Y. Hatsugai, and H. Suzuki, "Chern Numbers in Discretized Brillouin Zone: Efficient Method of Computing (Spin) Hall Conductances"; J. Phys. Soc. Jpn. 74, (2005) 1674. همچنین اعداد چرن یکسان در این نمودار نیز روی خطوط راست با شیب یکسان ظاهر شدند. عدد چرن صفر با دایرههای سبز رنگ بصورت یک خط افقی در قسمت پایین نمودار در نمودارهای دیاگرام ونیر در هر دو شکل ظاهر می شود. در کل در نمودارهای شکل ٤ با افزایش پرش همسایگی دوم قدر مطلق مقادیر اعداد چرن کمتر می شود و بیشترین و کمترین مقدار عدد چرن مربوط به گافهای کوچک است که بدلیل افزایش تبهگنی ترازهای الکترونی به وضوح در نمودار دیده نمی شود. همچنین با مقایسهی نمودارهای دیاگرام فاز متوجه کاهش پهنای نوارها و به همان نسبت کاهش پهنای گاف نوار پایینی می شویم ولی گاف بین دو نوار پایینی و بالایی با افزایش پرش بیشتر می شود. با مقایسهی نمودارهای دیاگرام ونیر در هر دو شکل متوجه می شویم که با افزایش پرش چگالی ترازهای الکترونی در بخش پایین نمودار که مربوط به نوار پایین ساختار نواری است، نسبت به قبل بیشتر شده است.

### نتيجه گيرى

در مدل بررسی شده با محاسبهی طیف هافستدر و ساختار نواری شبکه در حضور پرش همسایهی دوم مشاهده کردیم که تقارن الکترون حفره و بازتابی در طیف فرکتال هافستدر از بین میرود و با افزایش مقدار پرش این عدم تقارن و همچنین تبهگنی ترازهای الکترونی بیشتر می شود.

دیده می شود که در غیاب پرش همسایگی دوم گاف بین نوارها در ساختار پروانهای باز می شود و طیف به سه بخش تقسیم می شود. ولی در حضور پرش همسایه دوم طیف هافستدر به دو بخش نامتقارن تقسیم می شود و تقارن الکترون – حفره و بازتابی در نمودار کاملا از بین می رود. عدم تقارن ساختار نواری نسبت به انرژی صفر نشان دهنده ی از بین رفتن توازن زیر شبکه ها در هر سلول واحد و همپنین ایجاد تمایز بین آنها می باشد. در نتیجه وجود پرش همسایه ی دوم باعث ایجاد این تمایز بین زیر شبکه ها است، بطوریکه همزمان وارونی شبکه را از بین می برد. همچنین این تمایز ایجاد شده در سلول های واحد روی شار گذرنده از هر سطح بسته تاثیر گذار است و باعث از بین رفتن تقارن بازتابی نسبت به





### ترابرد کوانتومی در مایع لاتینجر هلیکال برهم کنشی با حضور میدان زیمن بخشی پور، زینب<sup>\*</sup>؛ حسینی، میر وحید<sup>،</sup>

<sup>ا</sup>دانشکده فیزیک دانشگاه زنجان، زنجان

### چکیدہ

در این کار، ما حالتهای گاف دار همبسته ی قوی جدیدی از الکترون های با اسپین ۱/۲ را در ۱+۱ بعد پیشنهاد می کنیم که در گستره ی حالتهای گاف دار هلیکال قرار می گیرند. ناخالصی های مغناطیسی در حضور میدان تبادلی زیمن، تقارن وارونی زمان را می شکنند و منجر به یک مد گاف دار می شوند. ما خصوصیات ترابرد الکترونی را در مایع لاتینجر هلیکال با حضور برهم کنش های الکترون-الکترون و میدان زیمن بررسی می کنیم. به لحاظ محاسباتی، ما از چارچوب بوزونش و تکنیکهای مکمل آن نظیر آنالیز گروه باز بهنجارش و تابع حافظه بهره می گیریم.

واژه های کلیدی: مایع لاتینجر، حالتهای هلیکال، برهم کنش، میدان تبادلی زیمن، بوزونش، گروه باز بهنجارش، تابع حافظه

# Quantum transport in the interacting helical Luttinger liquid in the presence of the Zeeman field

#### Bakhshipour, Zeinab1\*; Hosseini, Mir Vahid1

<sup>1</sup> Department of Physics, University of Zanjan, Zanjan,

#### Abstract

In this work, we propose some new strongly correlated gapped states of spin-1/2 electrons in 1+1 dimensions, so called helical gapped states. Magnetic impurities in the presence of the Zeeman exchange field break time-reversal symmetry and lead to backscattering. We calculate the electron transport properties of the helical Luttinger liquid in the presence of the electron-electron interactions and Zeeman field. Computationally, we exploit the Bosonization framework and its complementing techniques like renormalization group (RG) Analysis and Memory function.

*Keywords*: Luttinger liquid- helical states- interaction- exchange Zeeman field- Bosonization- renormalization group- Memory function.

PACS No.

شامل می شوند. به عنوان یک مشخصه ی بارز مایع لاتینجر، توابع همبستگی در آن رفتار قانون توانی دارند که نما در آنها توسط برهم کنش ها کنترل می شود. به طور خاص، سیستم های یک بعدی هلیکال که در آنها شبه ذرات حرکت کننده در جهت های مقابل، اسپین های متفاوتی دارند، در لبه ی عایق های توپولوژیک (IT) به واسطه اثر هال کوانتومی که از طریق لایه برداری چاه طور تجربی، یک سیم کوانتومی که از طریق لایه برداری چاه

مقدمه

برهم کنش ها در یک بعد به یک فیزیک اساساً متفاوتی نسبت به همتاهای با ابعاد بالاتر می انجامند[1]. به واقع، اگر در ابعاد بالا، برانگیختگی ها به صورت ذرات جداگانه توصیف می شوند، در فیزیک یک بعدی، برهم کنش ها هر برانگیختگی را به یک نمونه ی دسته جمعی تبدیل می کنند. مفاهیم کلی مایع های لاتینجر توموناگا[1,2]، نمونه ای از چنین برانگیختگی های دسته جمعی را



کوانتومی InAs ایجاد شده است، می تواند میزبان هر دو برهم کنش الکترون – الکترون و اسپین – مدار قوی باشد[5]. نظریه ی مایع لاتینجر خصوصیات ترابرد غیر عادی را پیش بینی می کند[6,7,8]. ما در این کار، خصوصیات انرژی پایین را در حالتهای هلیکال با وجود برهم کنش الکترون –الکترون و در حضور میدان تبادلی زیمن بررسی نموده و تأثیر گاف و برهم کنش ها را روی خصوصیات ترابرد الکترونی ارزیابی می نماییم.

### همیلتونی یک بعدی با برهم کنش الکترون –الکترون

در سراسر این مقاله ما یک سیستمی را درنظر می گیریم که یک عایق توپولوژیک دو بعدی با حالتهای لبه ای هلیکال یک بعدی در حضور میدان تبادلی زیمن را شامل می شود. در این سیستم، هر دوی محور کوانتش اسپینی و راستای حرکت الکترون ها در لبه، در راستای محور X در نظر گرفته شده است. یک کار اخیر شامل دو ناخالصی مغناطیسی روی لبه های IT در یک میدان تبادلی زیمن است که در آن برهم کنش بین ناخالصی ها و فرمیون های دیراک قطبیده ی اسپینی سیار به عنوان اختلال درنظرگرفته شد[9]. همیلتونی که حالتهای دیراک گاف دار یک بعدی را توصیف می کند به شکل زیر می باشد:

 $\mathbf{H}_0 = \mathbf{v}_f k \boldsymbol{\sigma}^x + \Delta \boldsymbol{\sigma}^y \tag{1}$ 

بطوریکه  $v_f$  سرعت فرمی مد های لبه، k بردار موج در امتداد لبه و  $\sigma^{x,y}$  مؤلفه های x و y ماتریس های پائولی در فضای اسپینی می باشند. رابطه پاشندگی به صورت زیر می باشد

$$\mathcal{E}_{\pm} = \pm \sqrt{\left(v_f k\right)^2 + \Delta^2} \tag{(Y)}$$

از آنجائیکه محور کوانتش اسپینی در راستای محور x درنظرگرفته شده است، میدان تبادلی اعمال شده در صفحه ی عمود بر محور x. گافی به اندازه ی 2Δ در طیف لبه ایجاد می کند. این گاف، تبهگنی دو گانه ی نقطه ی دیراک را از بین می برد. ما به جهت رسیدن به همیلتونی انرژی پایین، حالتهای هلیکال گاف دار معادله ی (۱) را روی یکی از لبه های سیستم حول نقاط فرمی در ی ومنتوم های  $v_f v_f = \pm \sqrt{\varepsilon_f^2 - \Delta^2} / v_f$  خطی سازی می کنیم  $H_0 = v_f \psi'^{\dagger}(x) k \sigma^x \psi'(x) + \Delta \psi'^{\dagger}(x) \sigma^y \psi'(x)$  (۳)

$$\psi'(x) = \sum_{r} \chi_r(rk_f) \psi_r(x) e^{irk_f x}$$
(٤)

عملگرهای کایرال (۲٫(x) با ۲=R,L میدان های نابود کننده ی ذرات راست رونده و چپ رونده در مختصات لبه ی r هستند. ویژه اسپینورهای وابسته به مومنتوم به شکل زیر تعریف می شوند

$$\chi_r(rk_f) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} re^{i\theta_{k_f}} \\ e^{-i\theta_{k_f}} \end{pmatrix}$$
(\$\omega)

با زاویه ی چرخش  $\left(\frac{\Delta}{k_f v_f}\right) ArcTan\left(-\frac{\Delta}{k_f v_f}\right)$  که آمیخته ای از حالتهای اسپینی ناشی از گاف را نمایش می دهد. همیلتونی برهم کنشی با سهم های مربوط به پراکندگی رو به جلو  $g_2$  و پاشش گرای  $g_4$  به شکل زیر معرفی می گردد:

$$H_{e-e} = g_2 \psi'_L^{\dagger}(x) \psi'_L(x) \psi'_R^{\dagger}(x) \psi'_R(x) + \frac{g_4}{2} [(\psi'_L^{\dagger}(x) \psi'_L(x))^2 + (\psi'_R^{\dagger}(x) \psi'_R(x))^2] \qquad (7)$$

در چارچوب بوزونش[1] همیلتونی کل با جذب ترم گرادیان ناشی از گاف در بخش توان دوم به شکل زیر خواهد بود

$$H = \frac{v}{2} \left[ \frac{1}{K} (\partial_x \widetilde{\Phi})^2 + K (\partial_x \Theta)^2 \right] + \frac{\widetilde{\Delta}}{2\pi a_0} e^{i\sqrt{4\pi}\widetilde{\Phi}} + h.c.$$
(v)

که  ${\mathfrak O}$  و  ${\widetilde \Phi}$  میدان های بوزونی و K پارامتر بدون بعد لاتینجر، v  $\sim$ 

$$K = \sqrt{\frac{v_f \cos(2\theta_{k_f}) - \frac{g_2}{8\pi} + \frac{g_4}{8\pi}}{v_f \cos(2\theta_{k_f}) + \frac{g_2}{8\pi} + \frac{g_4}{8\pi}}}$$
(A)

$$v = \sqrt{\left(v_f \cos(2\theta_{k_f}) + \frac{g_4}{8\pi}\right)^2 - \left(\frac{g_2}{8\pi}\right)^2} \tag{9}$$

$$\widetilde{\Delta} = \Delta \exp\{-i \left| \varepsilon_f \right| \frac{K}{v} x + 2ik_f x\}$$
(1.).



### آناليز گروه بازبهنجارش

ما با استفاده از روشی که مبتنی بر توابع همبستگی می باشد، معادلات فلوی RG را بدست می آوریم[1]. این معادلات بیان می کنند که در جفت شدگی ضعیف، مد هلیکال به مقتضی مؤثر بودن ۵. گاف دار می شود. معادلات فلو به شکل زیر حاصل می شوند:

$$\frac{dK(l)}{dl} = -\frac{\pi^2}{4} y^2(l) K^2(l) J_0(\alpha(l)a_0)$$
(11)

$$\frac{dy(l)}{dl} = (2 - K(l))y(l) \tag{11}$$

$$\frac{d\alpha(l)}{dl} = \pi \frac{y^2(l)K(l)}{2}\alpha(l) \tag{17}$$

$$\frac{dt(l)}{dl} = \frac{\pi^2}{4} y^2(l) K^2(l) J_2(\alpha(l)a_0) \tag{12}$$

 $\alpha$  (*i*)  $\alpha_0$  بطوریکه  $y(l) = \frac{\sqrt{2\Delta(l)a_0}}{v}$  ثابت بدون بعد گاف، (*i*)  $\alpha$  پارامتر انحراف از گاف با بعد تکانه، (*l*) پارامتر ناهمسانگردی و  $J_{0,2}$  تابع بسل می باشد. معادله (۱۲) نشان می دهد که ترم اختلالی به ازای 2 > (l) نقش مؤثری خواهد داشت و گاف تولید می کند. در این کار دما به عنوان حد بالای انرژی درنظر گرفته شده است. بنابراین ما معادلات فلوی RG را در یک مقیاس طول <sup>\*</sup> مرتبط با مقیاس دمایی، متوقف می کنیم تا به یک حل مؤثر دست یابیم. مسیر های فلو مطابق معادلات (۱۲) و (۱۲) در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱ : فلوی RG مدل هلیکال گاف دار. برای پارامترهای زیر خط جداکننده (خط پر، تقریباً راست)، ۷ به صفر جریان می یابد(فاز مایع لاتینجر). برای K<2 یا بالای خط جداکننده، ۷ به سمت جفت شدگی قوی پیش می رود.

در رژیم گاف مؤثر y ای ثابت گاف y به سمت جفت شدگی قوی پیش می رود، در حالیکه در رژیم گاف غیرمؤثر، ثابت گاف به صفر جریان می یابد.

### رسانش الكتروني

وقتی سیستم های هلیکال در معرض میدان تبادلی قرار می گیرند، لبه ی نوار انرژی در k=0 خم می شود و سرعت حامل ها نزدیک لبه تغییر می کند و مدهای اسپینی در هر کدام از ذرات راست رونده و چپ رونده آمیخته می شود. این رویداد روی رسانش تأثیر می گذارد. ما خواهیم دید وابستگی دمایی رسانش در دماهای بالا به صورت یک قانون توانی رفتار می کند که نمای آن بوسیله ی گاف و برهم کنش ها کنترل می شود. روشی که ما برای ارزیابی وابستگی دمایی رسانش بر یک بوسیله ی گاف و برهم کنش ها کنترل می شود. روشی که ما برای ارزیابی وابستگی دمایی رسانش بار به کار گرفتیم مبتنی بر یک بویه اختاللی موسوم به تابع حافظه می باشد[1]. ما ارزیابی های تابع حافظه می باشد[1]. ما ارزیابی های آن بازبهنجارش بهبود می دهیم و در محدوده ی وسیعتری از دما به آنها اعتبار می بخشیم. به طور کلی تابع رسانش وابسته به دما و فرکانس را می توانیم بر حسب تابع حافظه به شکل زیر بنویسیم آنها اعتبار می توانیم بر حسب تابع حافظه به شکل زیر بنویسیم آنها اعتبار می توانیم بر حسب تابع حافظه به شکل زیر بنویسیم (مر)

$$M(\omega,T) \cong \frac{\left[\langle F;F \rangle^{0}_{\omega,T} - \langle F;F \rangle^{0}_{\omega=0,T}\right]/\omega}{-\chi(0)}$$
 طوريکه

RG جابجاگر بین همیلتونی و عملگر جریان است. مطابق فلوی F در معادله (۱۲)، ثابت گاف به شکل زیر بازبهنجار می شود $y(l) = y(0)e^{(2-K)l}$  (۱٦) به کمک این معادله ما به عبارت ارتقایافته رسانش دست می یابیم

$$\sigma(\omega = 0, T) \propto \frac{v(L_T)}{2\pi^6 T} y(L_T)^{-2} \left[ 1 - \frac{B}{A} \left( \frac{v(L_T)\alpha(L_T)}{4\pi T} \right)^2 \right]$$
(1V)

ضرایب بدون بعد A و B وابسته به پارامتر مایع لاتینجر K هستند که به روش تقریب در دماهای بالا بدست آمده اند. نمودار وابستگی دمایی رسانش در دماهای بالا و دماهای از مرتبه ی گاف در شکل۲ نمایش داده شده است. در شکل۲. الف مشاهده



میدان تبادلی، خمیدگی لبه های نوار انرژی را در پی دارد که به موجب آن سیستم دستخوش گاف می شود. محاسبات در چارچوب بوزونش و با استفاده از تابع حافظه انجام شد. عملگر توصيف كننده ى گاف به كمك ابزاز قدرتمند گروه بازبهنجارش در مدهای گاف دار و بدون گاف ارزیابی گردید و سیس بررسی ما از تابع حافظه توسط آن بهبود يافت، در نتيجه ما به وابستگي دمایی رسانش در طیف وسیعتری از دما دست یافتیم. ما دریافتیم که در دماهای بالا، رسانش یک رفتار قانون توانی مبتنی بر اختلال دارد. با کاهش دما رسانش افزایش می یابد و با افزایش مقدار ضریب گاف مقدار این افزایش تقلیل می یابد. در دماهای از مرتبه گاف، رسانش با کاهش دما افت می کند و با افزایش مقدار ضریب گاف، این افت رسانش، شدیدتر خواهد بود. همچنین در ضریب گاف ثابت، افزایش اندازه ی پارامتر انحراف از گاف lpha، رسانش را در هر دو رژیم دمایی بالا و پایین، افزایش می دهد.

### مرجعها

- [V] T. Giamarchi, Quantum physics in one dimension. Clarendon press; 2003 Dec 18.
- [Y] FD. Haldane, Effective harmonic-fluid approach to low-energy properties of one-dimensional quantum fluids, *Physical Review Letters*. 1981 Dec 21;47 (25):1840.
- [\*] B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, Science 314, 1757 (2006).
- [٤] X. Qi, S.-C. Zhang, Rev. Mod. Phys. 83, 1057 (2011).
- [6] Y. Sato, S. Matsuo, CH. Hsu, P. Stano, K. Ueda, Y. Takeshige, H. Kamata, JS. Lee, B. Shojaei, K. Wickramasinghe, J. Shabani. Strong electron-electron interactions of a Tomonaga-Luttinger liquid observed in InAs quantum wires. *Physical Review* B. 2019 Apr 16;99 (15):155304.
- [7] CH. Hsu, P. Stano, Y. Sato, S. Matsuo, S. Tarucha, D. Loss. Charge transport of a spin-orbit-coupled Luttinger liquid. *Physical Review* B. 2019 Nov 21;100 (19):195423.
- [V] PP. Aseev, D. Loss, J. Klinovaja. Conductance of fractional Luttinger liquids at finite temperatures. *Physical Review* B. 2018 Jul 16;98 (4):045416.
- [A] AM. Visuri, M. Lebrat, S. Häusler, L. Corman, T. Giamarchi. Spin transport in a one-dimensional quantum wire. *Physical Review Research*. 2020 Apr 21;2 (2):023062.
- [9] MV. Hosseini, Z. Karimi, J. Davoodi. Indirect exchange interaction between magnetic impurities in one-dimensional gapped helical states. *Journal of Physics: Condensed Matter.* 2020 Dec 4;33 (8):085801.

\*E-Mail: Z.Bakhshipour@gmail.com



شکل۲ : وابستگی دمایی رسانش در رژیم دمای بالا و رژیم دمایی از مرتبه ی گاف (الف) برای ثابت های گاف مختلف، (ب) برای پارامترهای انحراف از گاف مختلف.

می شود که با کاهش دما رسانش افزایش می یابد. اعتبار این نمودار برای دماهای بالا می باشد. شکل الحاقی۲. الف توصیف کننده ی یک رفتار کاهشی برای رسانش در طی کاهش دما است که در دماهای از مرتبه ی گاف و کمتر معتبر می باشد. با رشد ضریب گاف Δ، ضریب رسانایی هر نمودار، مقدار کمتری به خود می گیرد. شکل۲. ب یک رفتار افزایشی در رژیم دمایی بالا و رفتار کاهشی در رژیم دمای پایین(الحاقی ۲. ب) را به تصویر می کشد. ملاحظه می کنیم که افزایش پارامتر انحراف از گاف *Ω* باعث افزایش ضریب رسانایی می شود.

### نتيجه گيرى

در این مقاله، وابستگی دمایی رسانش در مایع لاتینجر هلیکال در حضور برهم کنش و میدان تبادلی زیمن بررسی شد. اعمال





### مشاهده و تحلیل اثر کندو در ابررسانای دمای بالا Zr/Cu (2223) BSCCO

پشتيبان اصل ، فاطمه؛ دادمهر، وحيد؛ شهباز طهرانی، فاطمه؛ وفاجو، صدف

دانشکده فیزیک دانشگاه الزهرا تهران، آزمایشگاه پژوهشی مغناطیس و ابررسانا ، خیابان ده ونک، تهران

چکیدہ

در این پژوهش به بررسی رخداد اثر کندو در ابررسانای دمای بالا (222) BSCCO کم آلاییده به نانو ذرات Zr پرداخته شده است. تغییرات مقاومت ابررسانا مورد بررسی در غلظت ناخالصی ۲۰۰٬۰، تحت میدانهای مغناطیسی ۰۰/۳۰ و ۵۰/۰ تسلا در دماهای پایین، روند افزایشی را نشان میداد؛ این نتیجه در ابررساناها بسیار غیر معمول است. نتیجهی مشاهده شده آزمایشگاهی مشابهت بسیار زیادی با اثر کندو داشت و سبب تحقیق این اثر در نمونهی ابررسانا شد. برای اثبات رخداد این اثر در نمونهی ابررسانا به بررسی صحت روابط کندو در این نمونه پرداخته شده است. مقاومت اسپینی محاسبه شده توسط رابطه کندو در دماهای پایین، روند افزایشی عبارت لگاریمتی این رابطه را تصدیق میکند.

واژه های کلیدی: ابررسانای دمای بالا (2223) BSCCO، اثر کندو، مقاومت اسپینی

### Observation and analysis of the Kondo effect in high-temperature superconductor Zr/Cu BSCCO (2223)

Poshtibanasl, Fatemeh: Daadmehr, Vahid: Shahbaz Tehrani, Fatemeh: Vafajoo, Sadaf Department of Physics, University of Alzahra, AlZahra Magnetism and Superconductor Research Laboratory, Tehran

#### Abstract

This research investigates the presence of the Kondo effect in the high-temperature superconductor BSCCO (2223) low doped with Zr nanoparticles. The variation of the superconductor resistance with the density of impurity c = 0.002, under Tesla magnetic fields (H=0.30,0.40,0.65) at low temperatures, showed an increasing trend; This result is very unusual in superconductors. The observed result was very similar to the Kondo effect and caused the research of this effect in the superconductor sample. To prove the presence of this effect in the superconductor sample has been investigated. The spin resistance calculated by Kondo's equation at low temperatures confirms the increasing trend of the logarithmic terms of this equation.

Keywords: High-temperature superconductor BSCCO (2223), Kondo effect, Spin resistance

PACS No. 70, 74, 81

هاس و وندنبرگ مورد بررسی قرار گرفت، نتایج آنها بیانگر افزایش مقاومت ویژهی طلا در این بازهی دمایی بود. آنها ادعا کردند، این افزایش مقاومت ناشی از یک مکانیسم پراکندگی اضافی در مقاومت ویژه طلا است [۱]. تحقیقات در اوایل ۱۹۶۰ بیان می کرد که این افزایش مقاومت در دماهای پایین با ناخالصی مغناطیسی درون میزبان فلزی ارتباط دارد.ناخالصی مغناطیسی به دلیل اسپین الکترونهای جفت نشده در پوسته b یا f اتمی خود، دارای یک گشتاور مغناطیسی موضعی است[۲]. سرانجام کندو در سال ۱۹۶۴ در آزمایشگاه خود حداقل مقاومت برخی از آلیاژهای مغناطیسی رقیق را مورد بررسی قرار داد و بیان کرد که در دماهای نزدیک به

مقدمه

نخستین بار بشر با کشف فلزات رسانا با مفهوم مقاومت الکتریکی آشنا شد؛ هر چقدر دما بیشتر باشد مقاومت الکتریکی افزایش و در نتیجه جریان کاهش مییابد. لذا انتظار میرفت که مقاومت الکتریکی یک تابع یکنواخت و خطی از دما باشد، در حالی که آزمایشات تجربی در فلزات رسانا هنگامی که دما به صفر کلوین میل می کرد، روند دیگری را نشان میداد. فیزیکدانها نظریههای متفاوتی را برای روند مقاومت الکتریکی در این بازه یدمایی خاص بیان کردند. در سال ۱۹۳۴، مقاومت ویژه فلزات در دماهای بسیار پایین توسط بور، استفاده از تقریب Born مرتبهی دوم محاسبه نمود. این مقاومت ناشی از اینگونه پراکندگیها را مقاومت ویژه اسپینی می نامند که به صورت رابطه (۱) تعریف می شود.

$$\rho_{spin} = c\rho_{M} \left\{ 1 + \left( \frac{3ZJ_{int}}{\epsilon_{F}} \right) logT \right\}$$
(1)

در رابطه (۱)، c مقدار ناخالصی، z تعداد الکترون رسانا در هر اتم ماده میزبان،  $\epsilon_{\rm F}$  انرژی فرمی،  $J_{\rm int}$  ثابت برهمکنش بین اسپین اسپین الکترون رسانا و ناخالصی مغناطیسی است. J<sub>int</sub> ممکن است مثبت، الکترون رسانا و ناخالصی مغناطیسی است. J<sub>int</sub> ممکن است مثبت، 0 مکن این برهم کنش تمایل دارد تا گشتاورهای مغناطیسی الکترون رسانشی و گشتاورهای مغناطیسی ناخالصی را در یک جهت قرار دهد، یعنی حالت فرو مغناطیسی) یا منفی  $0 > J_{\rm int}$  (این برهمکنش تمایل دارد تا گشتاورهای مغناطیسی الکترون رسانشی و گشتاورهای مغناطیسی ای منفی  $0 > J_{\rm int}$  (این برهمکنش تمایل دارد تا گشتاورهای مغناطیسی الکترون رسانشی و قرار دهد، یعنی حالت فرو مغناطیسی ای منفی  $0 > J_{\rm int}$  (این برهمکنش تمایل دارد تا لحظه های مغناطیسی الکترون رسانشی و برهمکنش تمایل دارد تا لحظه مای مغناطیسی الکترون درسانشی و برهمکنش تمایل دارد تا لحظه مای مغناطیسی الکترون درسانشی و منبی و این مین و مغناطیسی الکترون درسانشی و مناطیسی داد د تا مخالصی دا در جهت مخالف قرار دهد، یعنی حالت که حالت آنتی فرومغناطیسی است که مناطیس است که منجر به اثر کندو می شود.



شکل ۱ : تبادل موقت اسپینی در پراکندگی مرتبه دوم، هنگامی که جهت اسپین الکترون رسانشی و ناخالصی خلاف جهت است.



شکل ۲ : تبادل موقت اسپینی در پراکندگی مرتبه دوم، هنگامی که جهت اسپین الکترون رسانشی و ناخالصی هم جهت است.

صفر کلوین، ناخالصیهای مغناطیسی منجر به یک فرآیند پراکندگی مي شوند كه شامل تبادل موقت جهت اسپين بين الكترون رسانشي و ناخالصی مغناطیسی است؛ که این پراکندگی و تبادل اسپینی در مقاومت ویژه فلز سهمی را ایجاد میکند که با لگاریتم دما متناسب است. به عبارت دیگر کندو باور داشت هنگام استفاده از نظریه اختلال برای مدل کردن پراکندگی از یک ناخالصی مغناطیسی، عبارت مرتبه دوم در محاسبات میتواند بزرگتر از اولی باشد که قابل چشم پوشی نخواهد بود و منجر به وابستگی مقاومت یک فلز به دما به صورت لگاریتمی می شود [۱]. برای درک بهتر اثر کندو تبادل بين اسپين يک الکترون ناخالصي و اسپين الکترون رسانشي در نظر می گیریم که یک الکترون ناخالصی مغناطیسی (انرژی فرمی کمتری نسبت به الکترون دریای فرمی شبکه دارد.) در یک شبکه فلزی قرارگیرد. در دماهای نزدیک به صفر کلوین، با توجه به اصل عدم قطعيت هايزنبرگ؛ الكترون ناخالصي مغناطيسي مي تواند خود به خود به یک حالت اشغال نشده نزدیک سطح دریای فرمی تونل بزند؛ اگر در مدت زمان محدود شده توسط اصل عدم قطعیت هایزنبرگ، یک الکترون رسانشی بتواند از دریای فرمی به حالت موجود در ناخالصی برسد، به بیان دیگر دو الکترون بتوانند تونل بزنند و حالات یکدیگر را اشغال کنند، نیازی نیست که اسپین این دو الكترون يكسان باشد، زيرا دراين حالت تبادل اسپيني نيز مي تواند رخ دهد. تبادل اسپيني كه بين الكترون رسانشي و الكترون ناخالصي مغناطیسی رخ میدهد، انرژی سیستم را تغییر میدهد و سیستم را در حالتی جدید قرار میدهد. این حالت جدید، با همان انرژی سطح فرمی، حالت تشدید کندو نامیده می شود و باقی الکترون های رسانشی که در نزدیکی سطح فرمی قرار دارند را به طور مؤثر پراکنده می کند. با پراکنده شدن این الکترون های رسانشی، مقاومت ویژه درون فلز به صورت لگاریتمی افزایش خواهد یافت. مقاومت ویژهی ناشی از اثر کندو که خود را به صورت لگاریتم دما در روابط نشان مىدهد، بر اثر تعداد بسيار زيادى از تبادلات بين اسپين الكترون رسانشی و الکترون ناخالصی مغناطیسی است که در بالا اشاره شد [۴]. كندو تمامي تبادل هاي احتمالي كه بين اسپين الكترونهاي رسانشی و ناخالصیهای مغناطیسی رخ میدهد و سبب پراکندگی و در نتیجه افزایش مقاومت ویژه به صورت لگاریتمی را می توان با



مغناطیسی بسیار کم، میدانهای مغناطیسی بسیار ضعیف و دماهای نزدیک به صفر کلوین، اثر کندو میتواند نمود پیدا کند و لذا میتوانیم شاهد مقاومت اسپینی در نمونه ابررسانا باشیم. به این منظور ابررسانای سرامیکی دمای بالا (ESCCO(2223) SSCCO(2223) را به روش سل- ژل در آزمایشگاه پژوهشی مغناطیس و ابررسانا دانشگاه الزهرا ساخته و عنصر زیرکونیم با در صد وزنی ۲۰۰۲ را جایگزین عنصر مس در این ترکیب کرده ایم. به نمونهی ساخته شده میدانهای مغناطیسی ۳، ۴ و % کیلو گاوس اعمال شده است و مقاومتهای مشاهده شده به صورت مشاهده شد که هر چه دما از دمای Tc<sup>Offset</sup> در این درسانا کمتر میشود مقاومت افزایش مییابد[۵]. در این دما، گاز الکترونی به مورت کامل شکل گرفته است و تشکیل جفتهای کوپر در ابررسانا به حداکثر مقدار خود رسیده است و از این دما به بعد میتوانیم شاهد شکست جفت کوپر باشیم و در نتیجه اثر کندو میتواند نمود پیدا کند.



### مشاهدات و نتایج

روند افزایشی مقاومت در دماهای پایین در ابررسانای دمای بالا BSCCO(2223) کم آلاییده به نانو ذرات Zr سبب شد که به بررسی اثر کندو در این نمونه پرداخته شود. برای اثبات رخداد اثر کندو در این نمونه، روابط کندو برای هر سه میدان مغناطیسی اعمالی به نمونه محاسبه شد و مطابقت تجربی آنها با نتایج آزمایشگاهی مورد بررسی قرار گرفت. در نهایت با محاسبات بسیار زیادی که م نیز به صورت زیر تعریف می شود. م

$$\rho_{M} = \frac{3\pi m J_{int}^{2} S(S+1) (V/N)}{2e^{2} h \epsilon_{E}}$$
(7)

و در نتیجه مقاومت کل در یک آلیاژ مغناطیسی رقیق را به صورت مجموع سه عبارت بیان کرد؛ مقاومت ناشی از شبکه ρ<sub>L</sub>، مقاومت ناشی از پتانسیل ناخالصی ρ<sub>A</sub> و مقاومت ناشی از پراکندگی اسپینی با عامل logT.[۳]

$$\rho = \rho_L + c\rho_A + c\rho_M + c \left(\frac{3ZJ_{int}\rho_M}{\epsilon_F}\right) logT \quad (\tilde{r})$$

### ابررسانا دما بالا (BSCCO(2223 آلاییده به نانو ذرات Zr

اثر کندو را می توان به صورت تبادل میدان مغناطیسی با گاز فرمی نیز تعریف کرد. بدین منظور می توان حاملین بار ابررسانای دمای بالا (BSCCO(2223 در حالت ابررسانایی را به عنوان گاز فرمی در نظر گرفت. از آن جهت که نمونه ابررسانا است، انتظار داریم مقاومت ویژهی آن از دمای گذار به بعد صفر باشد و ماده دیامغناطیس کامل باشد؛ یعنی شار مغناطیسی را به طور کامل از درون خود طرد کند. اما به دلیل اینکه (BSCCO(2223)

ابررسانای دمای بالا است، همانند ابررسانای متعارف نوع II رفتار می کند، یعنی تا زمانی که میدان مغناطیسی خارجی که اعمال می کنیم کمتر از میدان مغناطیسی بحرانی Hc1 ابررسانا باشد، ماده به صورت ابررسانا باقی می ماند. علاوه براین، اگر نمونه ی ابررسانا مورد بررسی را به ناخالصی مغناطیسی آلاییده کنیم، حضور ناخالصی مغناطیسی باعث ازبین رفتن ابررسانایی در این نمونه نمی شود زیرا جفتهای کوپر که یکی از عوامل مهم ایجاد ابررسانایی هستند، به طور کامل شکسته نمی شوند و مهم ایجاد ابررسانا حضور خواهند داشت. اولین نمود حضورآلایش ناخالصی مغناطیسی در این نمونه ی ابررسانا، کاهش دمای گذار آن نسبت به نمونه ی خالص آن است. دومین نمود حضور ناخالصی مغناطیسی می تواند سبب مشاهده ی اثر کندو در شرایطی خاص باشد؛ یعنی در غلظتهای ناخالصی

انجام شد، ضرایب لگاریتمی محاسبه شده درون مقاومت اسپینی کندو به شکل جدول زیر به دست آمده است. همان طور که از نتایج به دست آمده جدول (۱) مشخص است، ضرایب لگاریتمی در هر سه میدان مغناطیسی با تقریب بسیار خوبی یکدیگر را تأیید میکنند که این نشان دهندهی درستی و صحت روابط کندو درون نمونهی ابررساناست. همچنین روند افزایشی مقاومت اسپینی که به صورت لگاریتمی در نتایج آزمایشگاهی ما طبق شکل (۳) به دست آمده بود، توسط محاسبات رابطه کندو در ابررسانا نیز تأیید شد.

جدول۱ : مقایسهی ضرایب لگاریتمی محاسبه شده و آزمایشگاهی

H(T)	experimental	calculated
۰/۳۰	۱/۳۰۲	1/9 £ 1
•/٤•	1/229	1/777
•/٦٥	•/٨١١	•/٦•٨

به عنوان مثال، مقاومتهای به دست آمده از محاسبات کندو و مقاومتهای اندازه گیری شده درآزمایشگاه برای میدان ۰/۴۰ تسلا در شکل (۴) رسم شده است. همانطور که از شکل مشخص است روابط کندو درون ابررسانا توانسته اند روند افزایشی مقاومت اسپینی را مانند تجربه درست پیش بینی کنند.



شکل ۴: نمودار تطبیق روند افزایشی مقاومت به صورت لگاریتمی در میدان ۰/۴۰ تسلا

با مقایسهی خطای نسبی ضرایب لگاریتمی، مشاهده شده است که میدان ۰/۴۰ تسلا یک میدان بهینه برای محاسبهی روابط کندو در نمونهی ابررسانای مورد نظر است.



شکل ۵: خطای نسبی محاسبهی ضریب لگاریتمی مقاومت اسپینی

نتيجه گيري

BSCCO(2223) الایده ما ابررسانای دمای بالا (2223) BSCCO(2223) کم آلاییده به نانوذرات Zr تحت تأثیر میدانهای مغناطیسی ۰/۳۰ ، کم آلاییده به نانوذرات Zr تحت تأثیر میدانهای مغناطیسی ۰/۴۰ ، مقاومت ویژه نشان می دهد که این روند افزایشی، احتمال رخداد اثر کندو در این نمونه را ارائه می دهد. با تطبیق روابط کندو توانستیم رخداد اثر کندو در این ماده را اثبات کنیم. با توجه به اینکه محیط ابررسانای دمای بالای BSCCO(2223) فاقد مقاومت الکتریکی ترابردی است و یک گاز فرمی کامل به حساب می آید؛ در غلظت ناخالصی کم و میدانهای مغناطیسی بسیار ضعیف، مقاومت اسپینی ناشی از اثر کندو در این ماده نمود پیدا میکند. در این مقاله، میدان نور نمونه بازی میکند و می توان نتیجه گرفت که اثر کندو در نمونههای کم آلاییدهی مغناطیسی، هنگامی رخ می دهد که میدان در نمونههای کم آلاییدهی مغناطیسی، هنگامی رخ می دهد که میدان در نمونههای کم آلایده که مغناطیسی، هنگامی رخ می دهد که میدان در باشد.

مرجعها:

- [1] Child, T., Cross, M., Tully, A., & Werner, M. An Introduction to the Kondo Effect. Notas de PHYS. (2018)
- [2] Kondo, J., & Hewson, A. Kondo effect. Scholarpedia, 4(3), 7529. (2009).
- [3] Kondo, J. Resistance minimum in dilute magnetic alloys. Progress of theoretical physics, 32(1), 37-49. (1964).
- [4] Kouwenhoven, L., & Glazman, L. Revival of the Kondo effect. Physics world, 14(1), 33. (2001)

[۵] وفاجو، صدف؛ دادمهر، وحید؛ ساخت و بررسی خواص ساختاری و ترابرد الکتریکی ابررسانای دمای بالا (BSCCO(2223 آلاییده با نانو ذره ITr دانشگاه الزهرا؛ دانشکده فیزیک و شیمی؛ سال۱۳۹۷



RI



### تاثیر دمای بستر بر ویژگی فیزیکی لایه های نازک اکسید مولیبدن تهیه شده به روش افشانه گرمایی

### به منظور کاربرد در دیود

عطایی، مجتبی '، فدوی اسلام، محمد رضا' ؛

<sup>ا</sup>دانشکده فیزیک دانشگاه دامغان، میدان دانشگاه، دامغان

چکیدہ

در این پژوهش باهدف ساخت دیود و مطالعه تاثیر دمای بستر بر ویژگی آن لایههای نازک اکسید مولیبدن در دماهای بستر ۳۵۰، ۵۰۰ و ۵۰۰ درجه سانتیگراد بر روی بسترهای سیلیکون آلایش شده نوع P به روش افشانه گرمایی لایه نشانی شدند. ویژگی های ساختاری و نوری این لایه ها مشخصه یابی شدند. مشخصه یابی ساختاری نشان داد که آنها دارای ماهیتی بس بلوری با ساختار راست گوشی می باشند و قله های مربوط به صفحات (۲۰۰)، (۲۰۰) و (۲۰۰) را نشان میدهند که قله ارجح در تمام نمونه ها (۲۰۰) می باشد. ریخت شناسی سطح نمونه ها بدون ترک و دارای دانه بندی مستطیل شکل می باشند و زبری متوسط سطح آنها در گستره ۱۰۹۰ تا ۱۹۷۷ نانومتر و تابع شرایط لایه نشانی است. گاف نوری نمونه ها در گسترهای ۲۸۶ تا ۲٫۹۵ تخمین زده شد. نمودار ولتاژ – جریان نمونه ها رفتار دیودی آنها را نشان می دهند. علاوه بر آن دیود ساخته شده از لایه اکسید مولیبدن در دمای بنیگراد دارای کمترین ولتاژ آستانه می باشد.

واژه های کلیدی: اکسید مولیبدن، لایه نازک، اسپری پایرولیز، دیود پیوند p-n

# The effect of substrate temperature on the physical properties of molybdenum oxide thin films prepared by spray pyrolysis for use in diodes

Ataei, Mojtaba<sup>1</sup>, Fadavi Eslam, Mohammad Reza<sup>1</sup>;

<sup>1</sup> Department of Physics, University of Damghan, Damghan

#### Abstract

In this research, with the aim of making a diode and studying the effect of substrate temperature on its properties, thin films of molybdenum oxide were deposited at substrate temperatures of 350, 400, 450 and 500 °C on P-type silicon substrates by spray pyrolysis. The structural and optical properties of these films were characterized. Structural characterization showed that they have a crystalline nature with orthorhombic structure and showed the peaks related to (020), (040) and (060) planes, the preferred peak in all samples being (040). The surface shape of the samples is without cracks and have rectangular graining, and their average surface roughness is in the range of 157 to 167 nm and depends on the coating conditions. The optical gap of the samples was estimated in the range of 2.84 to 2.95 eV. The voltage-current diagram of the samples shows their diode behavior. In addition, the diode made of molybdenum oxide thin film has the lowest threshold voltage at the substrate temperature of 400 °C.

Keywords: Molybdenum oxide, thin film, spray pyrolysis, p-n junction diode

سلولهای خور شیدی، د ستگاههای سوئیچینگ و دیود پیوند n-دارد [۲]. این لایهها به روشهای رسوب لایه اتمی، چرخشی، بخار شیمیایی، کندوپاش مگنترون، حمام شیمیایی و افشانه گرمایی تهیه شده ا ست [۳]. در این پژوهش لایه های نازک اکسید مولیبدن به روش افشانه گرمایی در دماهای بستر مختلف بر روی زیر لایه سیلیکون آلایش یافته نوع p با هدف تشکیل پیوندگاه n-n، لایه نشانی شدند.

اکسید مولیبدن (MoO<sub>3</sub>) یکی از اکسیدهای فلزات واسطه است که به دلیل رسانایی الکتریکی بالا و انتقال نوری در ناحیه مرئی یک ماده کاربردی در دستگاههای اپتوالکترونیکی است [۱]. لایههای نازک اکسید مولیبدن با انرژی گاف نواری در گستره ۲/۳۹ تا ۳ الکترون ولت، نیمر سانای نوع n میباشد که کاربردهای و سیعی در زیست پزشکی، حسگر گاز، باتریها، شبه خازنها، الکتروکرومیک،

مقدمه



$$\delta = \frac{1}{D^2} \tag{7}$$

$$\varepsilon = \frac{\beta \cos \theta}{D^2} \tag{7}$$

در این روابط  $\theta$  زاویه پراش و  $\beta$  نیم پهنا در نصف بیشینه قله پراش است. نتایج این محاسبات در جدول (۱) ارائه شده است. نتایج محاسبه اندازه نانوبلورکها با استفاده از رابطه شرر برای صفحه (۰٤۰) نشان داد که اندازه آنها با افزایش دمای بستر از ۳۵۰ تا 2°۰۰افزایش و سپس با افزایش دما تا 2°۰۰ کاهش مییابد. این احتمالا به این دلیل است که در دمای 2°۰۰ واکنش شیمیایی مناسب برای تشکیل لایه نازک اکسید مولیبدن بر روی بستر رخ می دهد. در مقابل، افزایش دمای بستر به بالاتر از 2°۰۰ باعث می شود که محلول پاشش انرژی حرارتی بیشتر از مقدار مورد نیاز برای تشکیل ساختار بلوری فاز اکسید مولیبدن دریافت کند که می تواند منجر به تجزیه حرارتی ناقص و کاهش بلورینگی لایهها شود [٥].



شکل ۱: الگوهای پراش پرتو ایکس لایه های نازک اکسید مولیبدن تهیه شده در دماهای بستر مختلف

روش آزمایش

محلول پاشش ۱٫۱ مولار مولیبدن از حل ۳٫۰۹۸ گرم پیش ماده آمونیوم مولیبدات چهار آبه (NoH24M07O24) در ۵۰ میلیلیتر آب دیونیزه تهیه شد. لایه ها در شرایط یکسان فاصله ۳۵ سانتی متری بین نازل و بستر، نرخ چرخش ۳۰ دور در دقیقه صفحه داغ، نرخ پاشش ۵ میلیلیتر بر دقیقه و فشار ۳ اتمسفر گاز حامل هوا در دماهای بستر ۳۵۰ تا ۵۰۰ درجه سانتیگراد با گام ۵۰ درجه سانتیگراد بر روی زیر لایه سیلیکون تشکیل شدند.

#### مشخصه يابى

جهت تعیین ساختار بلوری از دستگاه پراش پرتو ایکس (XRD) مدل D8 ADVANCE-BRUKER استفاده شد. برای مطالعه ریخت شناسی سطح میکروسکوپ الکترونی روبشی اثر میدان (FESEM) مدل MIRA3 TESCAN و میکروسکوپ نیرو اتمی (AFM) مدل Nano Wizard II و میکروسکوپ نیرو اتمی ویژگی های نوری از نور سنج فرابنفش – مرئی (UV-Vis) مدل Shimadzo-1800 در گستره طول موج ۳۰۰ تا ۱۱۰۰ نانومتر استفاده شد. مشخصه جریان–ولتاژ دیودها در دمای اتاق انجام شد.

### نتايج و بحث

الگوهای پراش پرتو ایکس لایه های نازک اکسید مولیبدن تهیه شده در دماهای بستر مختلف در شکل (۱) ارائه شده است. نتایج XRD نشان می دهد که آنها دارای ساختار بس بلوری و در فاز ترمودینامیکی ۵-MoO (اورتورومبیک) و در ساختار بلوری راست گوشی رشد یافتهاند. قلههای پراش نمونهها برای صفحات بلوری (۲۰۰)، (۰٤۰) و (۰۲۰) با کارت استاندارد JCPDS به شماره ۱۰۰۰–۰۰۰ مطابقت دارند [٤]. قله ارجح برای تمام نمونهها مربوط به صفحه (۰٤۰) می باشد. با افزایش دمای بستر از ۳۰۰ تا  $2^{\circ}۰۰$ ، شدت قلهها افزایش یافته است و سپس با افزایش بیشتر دما بستر از شدت قلهها افزایش یافته است.

اندازه نانو بلورکها (D)، چگالی دررفتگی (δ) و میکروکرنشها (٤) برای راستای بلوری (۰٤۰) با استفاده از روابط زیر محاسبه شده است:

$$D = \frac{0.94\lambda}{\beta\cos\theta} \tag{1}$$



جدول ۱: مشخصات ساختاری برآمده از داده های XRD نمونهها ای بستر (<sup>۵</sup>) ۳۵۰ ۲۰۰ ۵۰۱ ۵۰۰

0	٤٥٠	٤٠٠	۳٥٠	دمای بستر (°)
۲٥٫٧٧	۲٥,٧٧	۲٥٫٨١	۲٥٫٧٢	2θ (°)
٨٦, ١	<b>٠</b> ٫٦٥٦	•,٧٧٢	•,٦•٩	FWHM
۲,٤٠٦	7,817	7,811	۲, ٤ • ٩	d (A°)
٤,١٦٨	٤'IVV	٤,١٧٦	٤,١٧٢	a (A°)
٣٢	٣٧	٤٨	۲٥	D (nm)
١,٨٦	١,٨٢	١,٧٦	١,٨٤	δ×1• <sup>10</sup>
				(lines/m <sup>2</sup> )
1,07	1,22	1,70	1,07	<sup>۳</sup> - ۱۰×3
,	,	,	,	(lines <sup>2</sup> m <sup>4</sup> )

بررسی ریخت شناسی سطح لایه ها توسط میکروسکوپ FE-SEM انجام شد و تصاویر آنها در شکل (۲) ارائه شده است. مطالعه این شکل نشان می دهد که بطور کلی ریخت شناسی لایه ها مشابه هستند و سطح آنها تقریباً صاف با چسبندگی یکنواخت و تقریبا عاری بدون سوراخ است و با دانه های مستطیلی شکل پوشیده شده است [7]. متوسط ابعاد دانه ها در دماهای ۳۵۰، ۲۰۰، ۵۰۰ و ۲۰۰ درجه سانتیگراد بترتیب ۲۱۰، ۲۱۰، ۱۷۰ و ۱۱۰ نانومتر تخمین زده شدهاند. تصاویر دو بعدی و سه بعدی میکروسکوپ نیروی اتمی لایه ها در شکل (۳) ارائه شده است. متوسط زبری سطح لایه های تهیه شده در دمای بستر ۳۵۰، ۲۰۰، ۱۵۸ و ۱۰۰ درجه سانتیگراد به ترتیب



شکل ۲: تصاویر FESEM اکسید مولیبدن در دماهای (الف) ۳۵۰، (ب) ۶۰۰. (پ) ٤٥٠ و (ت) ۵۰۰ درجه سانتیگراد



شکل ۳: تصاویر AFM اکسید مولیبدن در دو بعد و سه یعد در دماهای (الف) ۳۵۰، (ب) ٤٠٠،( پ) ٤٥٠ و (ت) ۵۰۰ درجه سانتیگراد

### بررسی ویژگی های نوری

شکل (٤) طیف های عبور نور لایه ها را در گستره طول موجهای ۳۰۰ تا ۱۱۰۰ نانومتر نشان می دهد. مطالعه این شکل نشان می دهد که لایه ها دارای شفافیت مناسبی در نواحی مرئی و نزدیک به فروسرخ هستند. بطوریکه متوسط شفافیت آنها بین ۱۰ تا ٤٥ درصد در ناحیه مرئی است. میزان عبور نوری لایه های نازک با افزایش دمای بستر از ۳۰۰ تا ۲۰۰ درجه سانتیگراد افزایش و سپس با افزایش بیشتر دمای بستر تا ۲°۰۰۰ کاهش می بابد. بیشترین عبور نوری برای نمونه تهیه شده در دمای بستر ۲°۰۰۰ می تواند به علت اندازه بیشتر نانو بلورک ها و اندازه دانه ها و زبری سطح کمتر نسبت به سایر نمونه ها باشد. کاهش زبری سطح موجب پراکندگی نور کمتر و در نتیجه افزایش عبور می باشد.



گاف نوری مستقیم را می توان از طریق اندازه گیری های جذب نوری با رسم نمودار  $^{2}(\alpha h\vartheta)$  بر حسب  $h\vartheta$  و با استفاده از رابطه تاوک (٤) و برونیابی قسمت خطی نمودار به ازای  $\bullet = h\vartheta$  تعیین کرد که ۵،  $\vartheta$  و  $_{8}$  به ترتیب ضریب جذب، مقدار ثابت و گاف نوری مستقیم می باشند [۷]:

(2)  $(\alpha h\vartheta)^2 = \beta(h\vartheta - E_g)$  (3)  $(\alpha h\vartheta)^2 = \beta(h\vartheta - E_g)$ بر حسب برا ساس این رابطه نمودار مقایسهای تغییرات  $^2(\alpha h\vartheta)$  بر حسب  $h\vartheta$  نمونهها در شکل (٥) نشان داده شده است. مقادیر گاف نوری نمونهها در گستره ۲٫۸٤ تا ۲٫۹۸ ول ورد شد. اندازه گاف اپتیکی لایه نازک اکسید مولیبدن به غلظت ماده اولیه، شرایط تهیه لایه، ساختار لایه و دمای بستر بستگی دارد. کاهش گاف نوری با افزایش ساختار لایه و دمای بستر استگی دارد. کاهش گاف نوری با افزایش دمای بستر را می توان به بهبود ساختار نمونه بدلیل افزایش شدت قله های پراش و اندازه نانوبلورکها نسبت داد. همچنین، افزایش اندازه دانه ها می تواند گاف نوری لایه ها را به دلیل اثر محدودیت کوانتومی کاهش دهد [۸].



### مشخصه یابی دیود پیوند p-n

دیودها بر اساس طرحواره شکل (٦) ساخته شده اند. نمودار مقایسهای جریان – ولتاژ دیودهای ساخته شده در شکل (۷) ارائه شده است. مطالعه این شکل رفتار دیودی نمونه ها را نشان می دهند. ولتاژ ضعیف در بایاس معکوس و افزایش نمایی ولتاژ در بایاس مستقیم نشان دهنده یکسوکنندگی مناسب نمونه ها میباشد. ولتاژ آسیتانه نمونه ها در دمای ۳۵۰، ۲۰۰، ۵۰۰ و ۰۰۰ در جه سانتیگراد به ترتیب ۲٫۱، ۲٫۱، ۹٫۹ و ۲ ولت تخمین زده شده است [۹].



شکل ۷: نمودار جریان – ولتاژ دیودهای ساخته شده

نمونه تهیه شده در دمای C<sup>°</sup> ٤۰۰ دارای ولتاژ آستانه کمتری از سایر دیودها میباشد که میتواند بخاطر بزرگ شدن و متراکم شدن نانوبلورکها باشد. از طرفی برای کاربردهای اپتوالکترونیک نظیر دیود پیوند p-n، لایه نازک باید دارای شفافیت بالا در ناحیه مرئی با شد. همانطور که مشاهده شد میزان عبور نوری لایههای نازک با افزایش دمای بستر تا C<sup>°</sup> ٤٠٠ ابتدا افزایش و سیس تا C<sup>°</sup> ٥٠٠ کاهش یافت. این افزایش میزان عبور نور و کاهش گاف نوری در



دمای C°۰۰ موجب بهبود بازترکیب الکترون – حفره در ناحیه تهی دیود و افزایش پدیده تونل زنی میشود که از عوامل موثر در کاهش ولتاژ آستانه میباشد.

### نتيجه گيرى

در این پژوهش پیوندگاه p-n با استفاده از زیرلایه سیلیکون نوع p و لایه نازک اکسید مولیبدن با خاصیت نیمر سانایی نوع n ساخته شدند. لایههای نازک اکسید مولیبدن به روش افشانه گرمایی تهیه شدند و تاثیر دمای بستر بر ویژگی های دیودها مطالعه شد. دیود تهیه شده در دمای ۲۰۰ درجه سانتیگراد دارای ولتاژ آستانه کمتری نسبت به سایر نمونهها بود.

### مرجعها

- [1] K. Anil, C. Shekhar Prajapati, and P. Sahay. "Results on the microstructural, optical and electrochromic properties of spraydeposited MoO3 thin films by the influence of W doping." *Materials Science in Semiconductor Processing* **104** (2019): 104668.
- [Y] Y. Bashir, M. Halim, M. Hashim, and M. Pakhuruddin. "Structural, optical, and electrical properties of spray-pyrolyzed MoO<sub>3</sub> thin films by varying precursor molarity, as hole-selective contact for silicon-based heterojunction devices." *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* 31, no. 23 (2020): 21802-21812.
- [r] O. Kamoun, , A. Boukhachem, S. Alleg, B. Jeyadevan, and M. Amlouk. "Physical study of nano-structured MoO<sub>3</sub> films codoped with cobalt and nickel in which there is a ferro-diamagnetic transition." *Journal of Alloys and Compounds* **741** (2018): 847-854
- [٤] S. Faraji, M-M. Bagheri-Mohagheghi, and M. Mousavi. "Study of the Synthesis Process of MoO<sub>3</sub> to MoS<sub>2</sub> Thin Films Deposited by Spray Pyrolysis: The Effect of [S/Mo] Mole Concentration and Sulfurization Process." *Journal of Electronic Materials* 50, no. 6 (2021): 3341-3347.
- [e] N. Benameur, M. A. Chakhoum, A. Boukhachem, M. A. Dahamni, M. Ghamnia, N. Hacini, J-P. Pireaux, and A. Ziouche. "Investigation of some physical properties of pure and Co-doped MoO3 synthesized on glass substrates by the spray pyrolysis method." *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena* 234 (2019): 71-79.
- [1] D. Ramesh, R. Kate, M. Nanasaheb, S. Mane. "Energy storage potential of sprayed α-MoO 3 thin films." *New Journal of Chemistry* 45, no. 2 (2021): 582-589.
- [v] A. Boukhachem, O. Kamoun, C. Mrabet, C. Mannai, N. Zouaghi, A. Y. Ş. E. Yumak, K. Boubaker, and M. Amlouk. "Structural, optical, vibrational and photoluminescence studies of Sn-doped MoO<sub>3</sub> sprayed thin films." *Materials Research Bulletin* **72** (2015): 252-263.
- [A] L. Boudaoud, N. Benramdane, A. Bouzidi, A. Nekerala, and Rachel Desfeux. "(MoO<sub>3</sub>)<sub>1-x</sub> (V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>)<sub>x</sub> thin films: *Elaboration and characterization*." *Optik 127*, no. 2 (2016): 852-854.
- [4] P. Vivek, J. Chandrasekaran, R. Marnadu, and S. Maruthamuthu. "Fabrication of illumination-dependent Cu/p-Si schottky barrier diodes by sandwiching MoO3 nanoplates as an interfacial layer via JNSP technique." *Journal of Electronic Materials* 49, no. 7 (2020): 4249-4264.





### وابستگی دمائی زاویه کر حالت ابررسانائی با تقارن برگشت زمان شکسته شده

یزدانی حمید ، مقداد ٔ ؛ مهرابی، وحید ٔ

ا گروه فیزیک، دانشگاه آیت اله بروجردی، بروجرد، لرستان

چکيده

در این تحقیق ما به بررسی وابستگی دمائی زاویه قطبی کر حالت ابررسانای Sr<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub> میپردازیم. در ابتلا با استفاده از نظریه پاسخ خطی، رسانندگی هال و وابستگی دمائی آن را محاسبه میکنیم و سپس با استفاده از این ضریب ترابردی متمرکز به بررسی زاویه کر و اثر دما بر روی این چرخش می شویم. ما پیدا میکنیم که مشخصه های اساسی نتایج ما، یعنی حضور یک پیک تشدید و رفتار سامانه همبسته قوی در فرکانس های بالا، بدون تغییر می مانند و هر دو با مقدار کاهش یافته دوباره اتفاق می افتاند. واژه های کلیدی: Sr<sub>2</sub>RuO4 رساننادگی هال، زاویه کر قطبی، فرمول کوبو

### Dependence of Kerr angle on temperature of the superconductivity state with TRSB

#### Yazdani-Hamid, Meghdad<sup>1</sup>; Mehrabi, Vahid<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Ayatollah Boroujerdi University, Boroujerd, Lorestan

#### Abstract

In this study, we consider the temperature dependence of the Kerr polar effect for the superconducting state of  $Sr_2RuO_4$ . First, using the linear response theory, we calculate the Hall conductivity and its temperature dependence and then with the help of this transport coefficient, we focus on the Kerr angle and the effect of temperature on this rotation. We find the main features of our results, i.e. the appearance of a resonance peak and the strongly correlated system behavior at high frequencies, are robust to temperature effects and both again occur but with smaller values.

Keywords: Sr<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub>, Hall conductivity, Kerr polar effect, Kubo formula

PACS No. 72, 74

کنار گذاشته شدهاند. همچنین بعضی از توابع گاف دو مولفهای هم تطابق خوبی از نظر مقدار با آزمایش اثر قطبی کر نداشتند و آنها نیز از رقابت حذف شدهاند [5].

توانائی حفظ ویژگی شکست تقارن برگشت زمان در برابر عوامل مختلفی از قبیل تنش، دما و هر نوع اختلالی از اهمیت خاصی برخودار است. به دلیل اینکه حفظ این خصیصه نشاندهنده حفظ رسانندگی هال غیرصفر، داشتن جریانهای سطحی خودبهخودی حتی با وجود نداشتن تکانه زاویهای خالص برای جفتهای کوپر میباشد [6]. جریانهای سطحی مذکور با حالتهای مقید آندریو مقدمه

ماده Sr<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub> به عنوان یک ماده سامانه قوی شناخته می شود که در دمای زیر **1.5K** تبدیل به ابررسانا می شود [1]. برخلاف پارامتر نظم ابررسانای، حالت نرمال این ماده به خوبی شناخته شده است که مایع فرمی می باشد [2]. توابع گاف بسیار زیادی برای حالت ابررسانائی این ماده پیشنهاد شده است که با توجه به آخرین نتایج تجربی جابه جائی نایت، بهترین جفت شدگی، جفت شدگی دو مولفه ای با ماهیت آزمایش زاویه کر قطبی سازگاری نداشتند [4]،



و همچنین نیروی برنولی رابطه بسیار نزدیکی دارند. پارامتر نظم ابررسانائی  $s + id_{xy}$  در بیشتر ویژگیها و رفتارها مشابه جفت-شدگیهای کایرال میباشند. بنابراین شناخت دقیق از این نوع جفت-شدگیها در بررسی ویژگیهای ابررسانای کایرال بهعنوان پایه محاسبات کوانتومی جدید میتوانند به ما کمک قابل توجهی کنند. در این پژوهش، ابتدا رسانندگی هال را با استفاده از فرمول کوبو برای حالت ابررسانائی  $Sr_2RuO_4$  با پارامتر نظم ابررسانائی + *s* دمائی زاویه قطبی کر را مورد مطالعه قرار میدهیم.

### مدل و روش

ماده  $Sr_2RuO_4$  دارای ساختار بلوری چهاروجهی است که سه اوربیتال  $d_{xx}$ ،  $d_{xy}$  و  $d_{yz}$  در سطح فرمی آن شرکت میکنند. تقارن چهار وجهی باعث میشود که یا اوربیتالهای یک بعدی  $d_{xz}$  میکنند. و  $g_{yz}$  و یا اوربیتال دوبعدی  $d_{xy}$  بهعنوان اوربیتالهای فعال شناخته شوند و مسئولیت حالت ابررسانائی را داشته باشند. برای داشتن پاسخ هال حالت ابررسانائی در مورد حالت تک اوربیتالی، حتما ناخالصی باید وجود داشته باشد و از آنجائیکه نمونه در حالت خلوص بالا تهیه میشود این مورد منتفی به نظر میرسد. اما در مورد اتفاق میافتد که با توجه به تحقیقات قبلی این مدل کامل تر خواهد بود. مدل تک اوربیتالی بیشتر در مورد ویژگیهای ترمودینامیکی به-اتفاق مدافتد که با توجه به تحقیقات قبلی این مدل کامل تر خواهد بود. مدل تک اوربیتالی بیشتر در مورد ویژگی های ترمودینامیکی به-عنوان مدل کامل تر شناخته میشود به دلیل اینکه چگالی حالتهای غالب نزدیک سطح فرمی ناشی از اوربیتال  $d_{xy}$  می باشد.

بر اساس توضیحات ارائه شده در بحث بالا، از مدل دو اوربیتالی استفاده میکنیم. در ابتدا هامیلتونین قسمت غیربرهمکنشی را می-نویسیم:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \Psi^{\dagger}(\mathbf{k}) H(\mathbf{k}) \Psi(\mathbf{k}),$$
  

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \xi_{xz}(\mathbf{k}) & g(\mathbf{k}) \\ g(\mathbf{k}) & \xi_{yz}(\mathbf{k}) \end{pmatrix}.$$
 (1)

$$\Psi^{\dagger}(\mathbf{k}) = (d_{xz}^{\dagger}(\mathbf{k}), d_{yz}^{\dagger}(\mathbf{k}))$$
 این رابطه در پایه اوربیتالی  $g(\mathbf{k})$  برهمکنش بین اوربیتالی و

تعریف می شوند:  
$$\xi_i(\mathbf{k}) \quad (i = xz, yz)$$
  
تعریف می شوند:

$$\begin{aligned} \zeta_{xz}(\mathbf{k}) &= -\mu - 2t_1 \cos k_x - 2t_2 \cos k_y, \\ \xi_{yz}(\mathbf{k}) &= -\mu - 2t_2 \cos k_x - 2t_1 \cos k_y, \\ g(\mathbf{k}) &= -2g \sin k_x \sin k_y. \end{aligned}$$
(2)  

$$\begin{aligned} y|_{t_1}(\log t_1) &= 0 \end{aligned}$$

مىباشند.  $t_1 = 0.4eV$  با $(t_2, g, \mu) = (0.1, 0.1, 1)t_1$ براى بدست آوردن پاسخ الكترومغناطيسى حالت ابررسانائى، نياز به نوشتن هاميلتونين در فضاى نامبو داريم:

$$H_{\rm SC} = \sum_{k} \Psi_{k}^{\prime \dagger} \overline{H}_{\rm SC}(\mathbf{k}) \Psi_{k}^{\prime},$$
  

$$H_{\rm SC}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} H(\mathbf{k}) & \Delta(\mathbf{k}) \\ \Delta^{\dagger}(\mathbf{k}) & -H^{*}(-\mathbf{k}) \end{pmatrix},$$
(3)

که اسپینور بهصورت  $(a_{kxz}^{+}, a_{kyz}^{+}, a_{-kxz}^{-}, a_{-kyz}^{-}) = \Psi$  است. علامتهای " $\hat{A}$ " و " $\overline{A}$ " بهترتیب به ماتریسهای 2×2 و 4×4 اشاره دارند.

$$\sigma^{T}(\omega) = \lim_{\mathbf{q}\to 0} \frac{1}{2\omega} [\Pi_{xy}(\mathbf{q},\omega) - \Pi_{yx}(\mathbf{q},\omega)],$$
  
$$\Pi_{xy}(\mathbf{q},\omega_m) = k_B T$$
  
$$\sum_{\mathbf{k},\omega_n} Tr[\bar{J}_x(\mathbf{k})\bar{G}_0(\mathbf{k},\omega_n)\bar{J}_y(\mathbf{k})\bar{G}_0(\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega_n+\omega_m)].(4)$$

ر این رابطه، تابع گرین به صورت  

$$\overline{G}_0(\mathbf{k}, \omega_n) = [i \, \omega_n \times I_{4\times 4} - \overline{H}_{\mathrm{SC}}(\mathbf{k})]^{-1}$$
 (5)  
ست. (**q**,  $\omega$ ) بردار موج و انرژی تابش الکترومغناطیس هستند،

بهترتیب  $\Theta_m \quad o_m \quad o$ 

$$\overline{J}_{l}(\mathbf{k}) = \widehat{J}_{l}^{np}(\mathbf{k}) \oplus \widehat{J}_{l}^{nh}(\mathbf{k}),$$
  

$$\widehat{J}_{l}^{np}(\mathbf{k}) = -e\nabla_{k_{l}}H(\mathbf{k}), \quad \widehat{J}_{l}^{nh}(\mathbf{k}) = e\nabla_{k_{l}}H^{*}(-\mathbf{k}),$$
  

$$\widehat{J}_{l}^{np}(\mathbf{k}) = \widehat{J}_{l}^{nh}(\mathbf{k}) = -e\sum_{\mathbf{k}}Tr\Psi_{\mathbf{k}}^{\prime\dagger}\widehat{v}_{l}(\mathbf{k})\Psi_{\mathbf{k}}^{\prime},$$



×10<sup>-5</sup>

(a)

10.0

8.0

6.0

2.0

0.0

-2.0

-4.0

4.0

3.0

2.0

1.0

0.0

-1.0

0.0

0.0

×10<sup>-5</sup>

σ<sup>H</sup>[e<sup>2</sup>/ħ] 4.0  $\alpha = 0$ 

0.2

0.2

*α* = 6

 $\Re[\sigma^{H}(\omega)]$ 

 $\Im[\sigma^{H}(\omega)]$ 

0.4

0.4

(c)

×10<sup>-5</sup>

6.0

4.0

2.0

0.0

-2.0

6.0

4.0

2.0

0.0

-2.0

0.0

0.0

×10<sup>-6</sup>

 $\alpha = 3$ 

0.2

0.2

 $\omega$ [eV]

*α* = 9

(b)



 $f_2(\mathbf{k}) - f_1(\mathbf{k})$ +  $\frac{F_2(\mathbf{k}) - F_1(\mathbf{k})}{(E_2(\mathbf{k}) - E_1(\mathbf{k}))((E_2(\mathbf{k}) - E_1(\mathbf{k}))^2 - (\omega + i\epsilon)^2)}).(7)$ 

در این جا  $E_1(\mathbf{k})$  در این جا  $E_2(\mathbf{k})$  در این جا مستند و  $E_1(\mathbf{k})$  در این جا

توزيع فرمى-ديراك است. براى محاسبات عددى  $\epsilon = 10^{-6}$  است.

دما از طریق تابع توزیع فرمی-دیراک و دامنه توابع گاف بهصورت

 $\Delta_{i}(\mathbf{k}) = \Delta_{0ai} \sqrt{1 - \frac{T}{T_{a}} \Delta_{ai}(\mathbf{k}) + i \Delta_{0bi} \sqrt{1 - \frac{T}{T_{max}} \Delta_{bi}(\mathbf{k})}, (8)$ 

 $d_{xy}$  و s – *Extended* و s به جفت شدگی s – *Extended* و s

 $d_{y_{7}}$  )  $d_{x_{7}}$  ) اور بیتال i = xz, yz, xz - yz برای اور بیتال i = xz, yz, xz - yz

) سهم جمله دوم (اول) برابر صفر است. برای جفت شدگی بین

اوربیتالی هر دو جمله وجود دارد. مقادیر دامنه تابع گاف برای جفت-

شدگی دروناوربیتالی  $eV = 0.23 imes 10^{-3} eV$  و برای بیناوربیتالی

در نظر گرفته شده است.  $T_c$  دمای گذار ابر رسانائی بر ای  $10^{-4} eV$ 

راستای X است و T<sub>TRSB</sub> دمای گذار ابررسانائی در راستای Y است

و تحت عنوان دمای شکست تقارن برگشت زمان در حالت

زير وارد محاسبات مي شود [7]:

ابررسانائي شناخته ميشود.

در



شکل ۱: رسانندگی هال دینامیکی برای دماهای مختلف

### نتايج و بحث

شکل (۱) قسمتهای حقیقی و موهومی رسانندگی هال را برای  $\alpha = 0.9$  سه دمای  $\alpha = 0.6$  ,  $\alpha = 0.3$  ,  $\alpha = T/T_c = 0$  و نشان میدهد. مقدار  $eta=T_c/T_{TRSB}=1.0638$  در نظر گرفته شده است [8]. همانطوريكه مشخص است دما باعث كاهش مقدار عددی قسمتهای حقیقی و موهومی رسانندگی دینامیکی هال می-شود. رفتار مشابهی حتی در دمای lpha = 0.9 وجود دارد اما با مقدار عددی پائین تر. دو مشخصه اصلی برای تمامی نمودارها وجود دارد: یک پیک مشخصه که تقریبا در  $\omega \approx 0.1 eV$  اتفاق می افتد و (۱) برای قسمت موهومی در واقع همان تکینگی فن هوف است بهدلیل اينكه قسمت موهومي رسانندگي هال ديناميكي توصيفكننده شبه-ذرات BCS می باشد. (۲) رفتار در انرژی های بالا که بیان کننده رفتار  $\infty \, \varpi^{-2}$  سامانه همبسته قوی است و وابستگی فرکانسی بهصورت دارد. بنابراین بهعنوان یک نتیجه می توان گفت که این دو ویژگی به



نکته است که داشتن پاسخ هال ناشی از مشخصه ذاتی Sr<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub> میباشد.

مرجعها

- A. P. Mackenzie and Y. Maeno; "The superconductivity of Sr2RuO4 and the physics of spin-triplet pairing"; *Reviews of Modern physics* 75, (2003) 657.
- [Y] C. Bergemann *etal.*; "Quasi-two-dimensional Fermi liquid properties of the unconventional superconductor Sr2RuO4"; *Advances in Physics* 52, No. 7 (2003) 639-725.
- [r] K. Ishida *etal.*; "Reduction of the <sup>17</sup>O Knight shift in the superconducting state and the heat-up effect by NMR pulses on Sr2RuO4"; *J. Phys. Soc. Jpn.* 89, (2020) 034712.
- [1] J. Xia etal.; "High resolution polar Kerr effect measurements of Sr2RuO4: Evidence for broken time reversal symmetry in the superconducting state"; *Physical Review Letters* 97, (2006) 167002.
- [o] M. Yazdani-Hamid; "Effect of nonequilibrium order parameter on the optical response of superconductor Sr2RuO4"; *Journal of Physics: Condensed matter* 34, No. 45 (2022) 455603.
- [7] A. Furusaki *etal.*; "Spontaneous Hall effect in a chiral p-wave superconductor"; *Physical Review B* 64, No. 5 (2001) 054514.
- [v] G. Wagner *etal.*; "Microscopic Ginzburg-Landau theory and singlet ordering in Sr2RuO4"; *Physical Review B* 104, (2021) 134506.
- [A] S. Gosh *etal.*; "Thermodynamic evidence for a two-component superconducting order parameter in Sr2RuO4"; *Nature Physics* 17, (2021) 199-204.

مشخصه ذاتی که همانا برهمکنشی بین اوربیتالی است، (g(**k**) ، برمی-گردد که حتی دما هم نمی تواند رفتار این دو را تغییر دهد. بر اساس کمیت (P(**k**)، هر دو قسمت حقیقی و موهومی متناسب با مربع دامنه تابع گاف می باشند که باعث می شود فقط اندازه رسانندگی هال را تحت تأثیر قرار دهد.

برای بدست آوردن زاویه کر قطبی و اثر دما بر روی آن، از فرمول زیر استفاده میکنیم:

$$\theta(\omega) = (\frac{4\pi}{\omega d}) \operatorname{Im}[\sigma^{H}(\omega)\rho(\omega)], \qquad (9)$$

که در اینجا d = 6.8A فاصله بینلایهای است و  $ho(\omega)$ به-صورت زیر تعریف می شود:

$$\rho(\omega) = \frac{1}{n(\omega)(n^2(\omega) - 1)},\tag{10}$$

که  $(\omega) = \sqrt{\varepsilon(\omega)}$  خست است. ضریب دیالکتریک دینامیکی هم بهصورت  $(\omega) \sigma(\omega) = \varepsilon_{\infty} + (4\pi i / \omega)\sigma(\omega)$  تعریف می شود که در آن  $((\omega + i \gamma)) / (2\pi i \omega) = -\omega_p^2 / (4\pi i (\omega + i \gamma))$  به صورت رسانندگی طولی تعریف می شود و در واقع رسانندگی درود است. در روابط بالا 10 =  $\omega_p$  ضریب دی الکتریک ماده زمینه است،  $\omega_p = 2.9eV$ 

آهنگ پراکندگی است.

شکل (۲) زاویه کر قطبی را برای دمای صفر و دماهای محدود نشان میدهد. در تمامی دماها یک پیک در محدوده 2g وجود دارد که ناشی از تکینگی فنهوف در شبهذرات است. محدوده مهم انرژی در ۵.8eV ص ست که ناحیه فرکانس تجربی است که در آن اندازه

زاویه کر در حدود 65nrad بدست آمده است که نتایج ما برای مقدار  $\alpha = 0$  با آن تطابق بسیار خوبی دارد. با افزایش دما مقدار زاویه کر قطبی کاهش می یابد، بطوریکه برای  $\alpha = 9$  این مقدار تقریبا در حدود 5nrad است.

### نتيجهگيرى

افزایش دما باعث کاهش مقدار عددی پاسخ هال میشود اما مشخصههای اساسی این پاسخ را تغییر نمیدهد که بیان کننده این





### جفت شدگی همدوس دو فرومغناطیس توسط فونون

شیردل هاور، مجید؛ زارع، بابک دانشکده فیزیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

#### چکیدہ

جفتشدگی دینامیک مغناطش در دو عایق فرومغناطیس که با یک لایه عایق غیرمغناطیسی از هم جدا شده اند، مورد بررسی قرار گرفته است. فونونهای برانگیخته شده توسط دینامیک مغناطش در فرومغناطیس، به واسطهی برهمکنش مغناطوکشسانی، می توانند اندازه حرکت زاویهای را به طور همدوس از طریق عایق غیرمغناطیسی حمل کرده و به فرومغناطیس دیگر منتقل نمایند. جفتشدگی مدهای مگنونی در دو فرومغناطیس به صورت یک دافعه ترازی در ویژه مدهای سامانه مشاهده می شود که نشان دهنده برهمکنش مگنون حمگنون می باشد.

واژه های کلیدی: فرومغناطیس، دینامیک مغناطش، مغناطوکشسانی ، دافعه ترازی.

### Coherent coupling of two ferromagnets by phonon

#### Shirdel-Havar, Majid; Zare, Babak

Department of Physics, Iran University of Science and Technology, Tehran

#### Abstract

The coupling of magnetization dynamics in two ferromagnetic insulators separated by a non-magnetic insulator layer has been investigated. Excited phonons by magnetization dynamics in a ferromagnet, through magnetoelastic interaction, can carry angular momentum coherently through a non-magnetic insulator and transfer it to another ferromagnet. The coupling of magnon modes in two ferromagnets is observed as a level repulsion in the system eigen-modes, which indicates the magnon-magnon interaction. **Keywords**: ferromagnetic, magnetization dynamics, magnetoelastic, level repulsion.

PACS No. 75

شود. تشدید فرومغناطیسی (FMR) مدهای کیتل، همه اسپینها به طور هم فاز و هم دامنه حرکت تقدیمی انجام میدهند، را برانگیخته میکند. در صورتی که نیروها و گشتاورهای موثر در حجم ماده تا حد زیادی از بین میروند. با اینحال، تنشهای مغناطوکشسانی دینامیکی در سطحها و فصلهای مشترک لایه فرومغناطیس یک منبع فونونها [۲] هستند و تولید آن توسط شرایط مرزی واپایش می شود.

یک ماده مغناطیسی که در این زمینه بسیار مورد توجه قرار گرفته است، لایههای عایق فرومغناطیس Yttrium Iron Garnet Gadolinium است که بر روی یک عایق غیرمغناطیسی (YIG) قرار داده می شود ، که هر دو کیفیت

#### مقدمه

انتقال همدوس اسپین یکی از اجزای مهم پردازش اطلاعات کوانتومی است، زیرا امکان اتصال، ذخیره و انتقال حالتهای کوانتومی را فراهم می کند. به طور معمول، این انتقال میتواند توسط الکترونها [1] و مگنونها [۲] در ابزارهای اسپینترونیکی صورت گیرد. افزون بر این، ارتعاشات شبکه نیز میتوانند اسپین را حمل و انتقال دهند [٤،٣].

ناهمسانگردی مغناطیسی و خاصیت مغناطوکشسانی در مواد مغناطیسی، منجر به جفتشدگی ارتعاشات شبکه بلوری و مغناطش میشود [٥] که می تواند منجر به انتقال تکانه زاویهای در فصل مشترک یک لایهی مغناطیسی و یک لایهی غیرمغناطیسی

آکوستیکی بسیار بالایی دارند. دینامیک مغناطش در VIG، فونونهای برانگیخته به واسطه جفت شدگی مغناطوکشسانی را به GGG پمپاژ میکند [۸،۷]، که به دلیل حمل اندازه حرکت زاویهای منجر به یک میرایی اضافی در دینامیک مغناطش می شود. علاوه بر این، در این ساختارها جریان اسپینی بلند-برد به واسطه حمل و این، در این ساختارها جریان اسپینی بلند-برد به واسطه حمل و در آن طول ترابرد اسپین بسیار بزرگتر از همتای آن توسط مگنونها در آن طول ترابرد اسپین بسیار بزرگتر از همتای آن توسط مگنونها

در این پژوهش، دینامیک مغناطش در دو لایه عایق فرومغناطیس که با یک لایه عایق غیرمغناطیس از هم جدا شدهاند را مطالعه می کنیم . دافعه ترازی ایجاد شده در ویژه مدهای این ساختار نمایانگر جفتشدگی همدوس دو لایه فرومغناطیس با یکدیگر است.



چپ و راست به دو عایق فرومغناطیس با بردار مغناطش m متصل شده است.

#### مدل نظرى

یک ساختار ناهمگن سه لایه شامل یک لایه عایق غیرمغناطیسی با ضخامت L که بین دو لایه عایق فرومغناطیس یکسان با ضخامت d قرار گرفته است، همانند پیکربندی که در شکل (۱) ارائه شده است را در نظر می گیریم. معادله LLG برای دینامیک مغناطش لایه فرومغناطیس با رابطه زیر داده می شود

 $\dot{\mathbf{m}}_{i} = -\gamma \mu_{0} \mathbf{m}_{i} \times \mathbf{H}_{\text{eff},i} + \alpha_{G} \mathbf{m}_{i} \times \dot{\mathbf{m}}_{i},$  (۱)  $\sum_{i=1}^{n} \mathbf{n}_{i} \times \mathbf{m}_{i},$   $\mathbf{m}_{i} \times$ 

میدان مغناطیسی مؤثر است که در آن  $\mathbf{H}_{\rm eff} = \mathbf{H}_{\rm mag} + \mathbf{H}_{
m mec}$  میدان مغناطیسی خارجی و میدان ناهمسانگردی  $\mathbf{H}_{
m mag}$  است و  $\mathbf{H}_{
m mec}$  میدان مغناطیسی نشأت گرفته از برهمکنش

(٢)  $\mathbf{H}_{\rm mag} = \omega_{\rm FMR} \hat{z} / (\gamma \mu_0),$ تشديد بسامد فرومغناطيسي با ثابت  $K \quad \omega_{\text{FMR}} \approx \gamma \mu_0 \left[ H_0 + 2 K / (\mu_0 M_s) - M_s \right]$ ناهمسانگردی است. همچنین، **H**<sub>mec</sub> متناسب با مشتق انرژی مغناطوکشسانی  $\mathcal{U}_{ ext{mec}}$  نسبت به بردار مغناطش و با رابطه V داده می شود [۷]، که در آن  $\mathbf{H}_{\mathrm{mec}} = - \nabla_{\mathbf{m}} \mathcal{U}_{\mathrm{mec}} / (\mu_0 V M_s)$ حجم لایه و  $M_{
m s}$  مغناطش اشباع میباشد.  $\mathcal{U}_{
m mec}$  برای یک فرومغناطیس با رابطهی زیر داده می شود [۱۰،۷]  $\mathcal{U}_{\text{mec}} = 2 \sum_{\alpha > \beta} \int_{V} B_{\alpha\beta} m_{\alpha} \left( \mathbf{r} \right) m_{\beta} \left( \mathbf{r} \right) S_{\alpha\beta} \left( \mathbf{r} \right) dV,$ (٣) که  $B_{lphaeta}=\delta_{lphaeta}B_{||}+(1-\delta_{lphaeta})B_{\perp}$  که  $B_{\perp}$ ، همچنين،  $\alpha, \beta = x, y, z$ آن که در تانسور کرنش، که در  $S_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \left[ \frac{\partial R_{\alpha}(\mathbf{r})}{\partial r_{\beta}} + \frac{\partial R_{\beta}(\mathbf{r})}{\partial r_{\alpha}} \right]/2$ آن *R*(r) میدان جابهجایی است. با توجه به جهت میدان خارجی، جهت مغناطش در پیکربندی تعادلی با رابطه  $\mathbf{m} = \hat{\mathbf{z}} + \delta \mathbf{m}$  داده می شود که  $\delta \mathbf{m} = m_x \hat{\mathbf{x}} + m_y \hat{\mathbf{y}}$  مؤلفه های نوسانی و کوچک هستند. در نتیجه، انرژی مغناطوکشسانی برای لایه فرومغناطیس با رابطەي زير بەدست مىآيد

مغناطوكشساني مي باشد. ميدان مغناطيسي خارجي ايستا در جهت

محور z و همجهت با محور آسان در نظر گرفته شده است،

اباراین  $\mathbf{H}_{\text{mag}}$  با رابطه زیر داده می شود  $\mathbf{H}_{\text{mag}}$ . ابنابراین  $\mathbf{H}_{\text{ext}} = H_0 \hat{z}$ 

$$\mathcal{U}_{\text{mec}} = B_{\perp} A \sum_{\alpha = x, y} m_{\alpha} \Big[ R_{\alpha} (z_2) - R_{\alpha} (z_1) \Big], \qquad (1)$$

$$\mathbf{H}_{\text{mec}} = -\frac{\omega_{\text{mec}}}{\gamma\mu_0 d} \Big( \mathcal{R}_x \hat{\mathbf{x}} + \mathcal{R}_y \hat{\mathbf{y}} \Big), \tag{6}$$

که  $\mathcal{R}_{x(y)} = \mathcal{R}_{x(y)}(z_2) - \mathcal{R}_{x(y)}(z_1)$  و  $\mathcal{O}_{\text{mec}} = \gamma B_{\perp}/M_s$  که به روابط (۲) و (۵)، می توان میدان های  $\mathbf{H}_{\text{mag}}$  و  $\mathbf{H}_{\text{mag}}$  را برای لایه فرومغناطیس چپ و راست بدست آورد و با جایگذاری  $\mathbf{H}_{\text{mec}} = \mathbf{H}_{\text{mag}} + \mathbf{H}_{\text{mec}}$  در روابط (٤) و (۵)، برای دینامیک مغناطش لایه چپ داریم

$$\dot{m}_{\pm 1} = \pm i\omega_{\rm mec} \left[ R_{\pm} \left( -L/2 \right) - R_{\pm} \left( -L/2 - d \right) \right] / d$$

$$\pm i\omega_{\rm FMR} m_{\pm 1} \pm i\alpha_{\rm G} \dot{m}_{\pm 1},$$
(7)

همینطور برای مغناطش لایهی راست داریم



جابهجایی در رابطه ی (۲) برای لایهی چپ به صورت  
جابهجایی در رابطه ی (۲) برای لایهی چپ به صورت  

$$R_{\pm 1}(-L/2) - R_{\pm 1}(-d - L/2) = \Omega_1 m_{\pm 1} + \Omega_2 m_{\pm 2},$$
 (۱۱)  
 $g$  در رابطهی (۷) برای برای لایهی راست به صورت  
 $R_{\pm 2}(d + L/2) - R_{\pm 2}(L/2) = \Psi_1 m_{\pm 1} + \Psi_2 m_{\pm 2},$  (۱۲)  
 $c$  داده می شود، که در آن  
 $\Omega_{1(2)} = 2i\sin(k_1 d/2) \Big[ \mathcal{A}_{1(2)} e^{-ik_1(L+d)/2} - \mathcal{B}_{1(2)} e^{ik_1(L+d)/2} \Big],$   
 $\Psi_{1(2)} = 2i\sin(k_2 d/2) \Big[ \mathcal{E}_{1(2)} e^{ik_2(L+d)/2} - \mathcal{F}_{1(2)} e^{-ik_2(L+d)/2} \Big].$   
 $\Psi_{1(2)} = 2i\sin(k_2 d/2) \Big[ \mathcal{E}_{1(2)} e^{ik_2(L+d)/2} - \mathcal{F}_{1(2)} e^{-ik_2(L+d)/2} \Big].$   
 $\Psi_{1(2)} = 2i\sin(k_2 d/2) \Big[ \mathcal{E}_{1(2)} e^{ik_2(L+d)/2} - \mathcal{F}_{1(2)} e^{-ik_2(L+d)/2} \Big].$   
 $\Psi_{1(2)} = 2i\sin(k_2 d/2) \Big[ \mathcal{E}_{1(2)} e^{ik_2(L+d)/2} - \mathcal{F}_{1(2)} e^{-ik_2(L+d)/2} \Big].$   
 $\Psi_{1(2)} = 2i\sin(k_2 d/2) \Big[ \mathcal{E}_{1(2)} e^{ik_2(L+d)/2} - \mathcal{F}_{1(2)} e^{ik_2(L+d)/2} \Big].$   
 $\pi_{1(2)} = 2i\sin(k_2 d/2) \Big[ \mathcal{E}_{1(2)} e^{ik_2(L+d)/2} - \mathcal{F}_{1(2)} e^{ik_2(L+d)/2} \Big].$   
 $\pi_{1(2)} = 2i\sin(k_2 d/2) \Big[ \mathcal{E}_{1(2)} e^{ik_2(L+d)/2} - \mathcal{E}_{1(2)} e^{ik_2(L+d)/2} \Big].$   
 $\pi_{1(2)} = 2i\sin(k_2 d/2) \Big[ \mathcal{E}_{1(2)} e^{ik_2(L+d)/2} - \mathcal{E}_{1(2)} e^{ik_2(L+d)/2} \Big].$   
 $\pi_{1(2)} = 2i\sin(k_2 d/2) \Big[ \mathcal{E}_{1(2)} e^{ik_2(L+d)/2} - \mathcal{E}_{1(2)} e^{ik_2(L+d)/2} \Big].$   
 $\pi_{1(2)} = 2i\sin(k_2 d/2) \Big[ \mathcal{E}_{1(2)} e^{ik_2(L+d)/2} - \mathcal{E}_{1(2)} e^{ik_2(L+d)/2} \Big].$   
 $(17)$   
 $-\omega_{mec} (\mathcal{A}_2 + \mathcal{B}_2) m_{-2}/d = 0,$   
 $[\omega - \omega_{FMR} + i\omega\alpha_G - \omega_{mec} (\mathcal{E}_2 + \mathcal{F}_2)/d] m_{-2}$   
 $-\omega_{mec} (\mathcal{E}_1 + \mathcal{F}_1) m_{-1}/d = 0,$   
 $\omega_{maxit.}$  Chartime plate charts and chart charts and chart charts and charts and charts and chart charts and chart charts and chart charts and chart chart charts and chart charts and chart chart chart chart charts and chart chart chart chart chart charts and chart ch

ین جمعت معاده به وصوع عسان می دمان می دینا که ویدی تروستامیس چپ و راست بواسطه فونون با یکدیگر جفت شدهاند. دینامیک مغناطش لایه ی چپ  $m_{-1}$  از طریق برهم کنش مغناطوالاستیک به دینامیک مغناطش لایه ی راست  $m_{-2}$  جفت شده است و بلعکس.

#### ویژه مدهای سامانه

جفت معادلات (۱۳) و (۱٤) را می توان به صورت معادله جفت معادلات (۱۳) و (۱۴) را می توان به صورت معادله ماتریسی  $\mathbf{W} = 0$  نوشت، که  $\mathbf{W} = 0$  و  $\mathcal{M}$  یک ماتریس  $\mathbf{Y} \times \mathbf{Y}$  وابسته به بسامد با درآیههای زیر است  $\mathcal{M}_{11} = \omega - \omega_{\text{FMR}} + i\omega\alpha_{\text{G}} - \omega_{\text{mec}} (\mathcal{A}_{1} + \mathcal{B}_{1})/d$  $\mathcal{M}_{12} = -\omega_{\text{mec}} (\mathcal{A}_{2} + \mathcal{B}_{2})/d$  $\mathcal{M}_{21} = \omega - \omega_{\text{FMR}} + i\omega\alpha_{\text{G}} - \omega_{\text{mec}} (\mathcal{E}_{2} + \mathcal{F}_{2})/d$  $\mathcal{M}_{22} = -\omega_{\text{mec}} (\mathcal{E}_{1} + \mathcal{F}_{1})/d$  $\mathcal{M}_{22} = -\omega_{\text{mec}} (\mathcal{E}_{1} + \mathcal{F}_{1})/d$  $\mathcal{M}_{21}$  مدها را برای این ساختار ناهمگن می دهد.

$$\begin{split} \dot{m}_{\pm 2} &= \pm i\omega_{\rm mec} \left[ R_{\pm} \left( L/2 + d \right) - R_{\pm} \left( L/2 \right) \right] / d \\ &\pm i\omega_{\rm FMR} m_{\pm 2} \pm i\alpha_{\rm G} \dot{m}_{\pm 2}, \end{split} \tag{V}$$

که با توجه به تقارن دورانی حول محور z ،  $m_x \pm i m_y$  و  $m_{\pm} = m_x \pm i m_y$  ، z برای لایه های مختلف با رابطه ی زیر داده می شود

$$R_{\pm}(z,t) = \begin{cases} A_{\pm}e^{ik_{1}z-i\omega t} + B_{\pm}e^{-ik_{1}z-i\omega t} & -d -\frac{L}{2} < z < -\frac{L}{2} \\ C_{\pm}e^{i\tilde{k}z-i\omega t} + D_{\pm}e^{-i\tilde{k}z-i\omega t} & -\frac{L}{2} < z < \frac{L}{2} \\ E_{\pm}e^{ik_{2}z-i\omega t} + F_{\pm}e^{-ik_{2}z-i\omega t} & \frac{L}{2} < z < \frac{L}{2} + d, \end{cases}$$
(A)

با بردارهای موج فونونی  $\sigma_{\perp} + 2i\eta\omega = \sqrt{\omega^2 + 2i\eta\omega}$  و  $r_{\perp}(\omega) = \sqrt{\omega^2 + 2i\eta\omega}$  و  $r_{\perp}(\tilde{c}_{\perp})$ ,  $\tilde{c}_{\perp}\tilde{c}(\omega) = \sqrt{\omega^2 + 2i\eta\omega}$   $m_{\perp}(\tilde{c}_{\perp})$ ,  $\tilde{c}_{\perp}\tilde{c}(\omega) = \sqrt{\omega^2 + 2i\eta\omega}$   $m_{\perp}(\omega) = \sqrt{\omega^2 + 2i\eta\omega}$  و ثابت میرایی کشسانی در لایه  $m_{\perp}(\omega) = \sqrt{\omega^2 + 2i\eta\omega}$  و ثابت میرایی کشسانی در لایه  $\tilde{c}_{\perp}\tilde{c}(\omega) = \sqrt{\omega^2 + 2i\eta\omega}$   $\tilde{c}_{\perp}\tilde{c}(\omega) = \sqrt{\omega^2 + 2i\eta\omega}$  و ثابت میرایی کشسانی در لایه  $\tilde{c}_{\perp}\tilde{c}(\omega) = \sqrt{\omega^2 + 2i\eta\omega}$  و ثابت میرایی کشسانی در لایه  $\tilde{c}_{\perp}\tilde{c}(\omega) = \sqrt{\omega^2 + 2i\eta\omega}$   $\tilde{c}_{\perp}\tilde{c}(\omega) = \sqrt{\omega^2 + 2i\eta\omega}$  $\tilde{c}_{\perp}\tilde{c}(\omega) = \sqrt{\omega^2 + 2i\eta\omega}$ 

$$\begin{cases} R_{\pm}(-L/2^{+}) = R_{\pm}(-L/2^{-}) \\ j_{\pm}(-d-L/2^{+}) = B_{\perp}m_{\pm 1} \\ j_{\pm}(-L/2^{+}) - j_{\pm}(-L/2^{-}) = -B_{\perp}m_{\pm 1}. \end{cases}$$
(9)

و برای فرومغناطیس راست داریم

$$\begin{cases} R_{\pm}(L/2^{+}) = R_{\pm}(L/2^{-}) \\ j_{\pm}(L/2^{-}) - j_{\pm}(L/2^{+}) = -B_{\perp}m_{\pm 2} \\ j_{\pm}(d+L/2^{-}) = B_{\perp}m_{\pm 2}. \end{cases}$$
(1.)

که  $2 = -\mu(z) \partial R_{\pm}(z)$  جریان تکانه عرضی است  $(z) \partial R_{\pm}(z) \partial R_{\pm}(z)$  جریان تکانه عرضی است  $(z) \partial R_{\pm}(z) \partial R_{\pm}(z)$  است و برای لایهی غیرمغناطیسی و آنتیفرومغناطیسی بهترتیب با  $\rho c_{\perp}^2 = \mu = \rho c_{\perp}^2$  و  $\mu = \rho c_{\perp}^2 = \tilde{\mu}$  تعریف می شود و  $\rho = \varphi$ گالی جرمی متناظر است. اکنون با استفاده از شرایط مرزی بالا می توان ضرایب  $\pm A$ ، ... و  $F_{\pm}$  را تعیین کرد. این ضرایب ترکیب خطی از  $m_{\pm} = m$  و  $m_{\pm}$  به صورت  $(z) - m_{\pm} = m_{\pm}$  هستند، که ضرایب  $A_{\pm}(\omega) = m_{\pm}$ ... و  $(\omega) m_{\pm} + \sigma_2(\omega) m_{\pm}$




شکل ۲: ویژه مدهای سامانه در حضور برهمکنش مغناطوکشسانی برای ساختار عایق ناهمگن VIG|GGG|YIG. خط چینهای آبی مدهای فونونی و خطهای توپر مدهای سیستم برهمکنشی میباشد. ضخامت اایه VIG و لایه GGG به ترتیب nm ۲۰۰ و μ۲ ۲۰ در نظر گرفته شده است.

برای بررسی ویژه مدهای سامانه، ضخامت عایق فرومغناطیس YIG و عایق غیر مغناطیس GGG به ترتیب ۲۰۰ nm و YIG در نظر گرفته شده است. همچنین، ضرایب ارائه شده در مرجع [۱۰] برای این دو ماده استفاده شده است. میدانهای مغناطیسی به ترتيب  $B_0 = 0.5802 \,\mathrm{T}$  با  $B_2 = B_0 - \Delta B$  و  $B_1 = B_0 + \Delta B$ به فرومغناطیس چپ و راست اعمال شده است. با جایگذاری این مقادیر در معادلات (۱۵) و به دست آوردن ریشههای دترمینان ماتریس M ویژه مدهای ساختار YIG|GGG|YIG بدست می آید، که در شکل (۲) ارائه شده است. خط چین های آبی مدهای فونونی متناسب با رابطه  $\omega_{
m ph,n} = 2\pi \tilde{c}_{\perp}/\lambda_{
m ph,n}$  را نشان میدهند، که  $\lambda_{\mathrm{ph},n} = 2(d+L)/n$  طول موج فونونی با شماره مد n است. همچنین خطهای تویر مدهای سامانهی برهمکنشی مگنون-فونون را نشان ميدهند. وجود برهمكنش مگنون-فونون به دليل مغناطوکشسانی منجر به ایجاد دافعه ترازی در محل برخورد مد فونون و مگنون شده است. دو مد فونونی با شماره n=130 و n=131، هر كدام با مد مگنونی در عایق فرومغناطیس چپ و راست برهمکنش میکنند که منجر به ایجاد ٤ دافعه ترازی شده است. افزون بر این، در محل تقاطع دو مد مگنونی نیز یک دافعه

ترازی دیده میشود که نمایانگر یک جفتشدگی غیرمستقیم، همدوس و بلندبرد مگنون–مگنون است که بواسطه فونون منتقل میشود.

نتيجه گيرى

دینامیک یک ساختار ناهمگن شامل یک لایه عایق غیرمغناطیسی که بین دو لایه عایق فرومغناطیس قرار گرفته، بررسی کردیم. به دلیل برهمکنش مغناطوکشسانی، اندازه حرکت زاویهای می تواند بواسطه فونونها از یک لایهی فرومغناطیس به لایهی دیگر منتقل شده و منجر به جفتشدگی غیرمستقیم دینامیک مغناطش در دو لایهی مغناطیسی شود. وجود دافعه ترازی در ویژه مدهای این ساختار در محل تقاطع مدهای مگنونی با یکدیگر نمایانگر این جفتشدگی غیرمستقیم است..

### مرجعها

- J. Sinova, S. O. Valenzuela, J. Wunderlich, C. H. Back, and T. Jungwirth, "Spin Hall effects", *Rev. Mod. Phys.* 87, (2015) 1213.
- [Y] A. V. Chumak, V. I. Vasyuchka, A. A. Serga, and B. Hillebrands, "Magnon Spintronics", *Nat. Phys.* 11, (2015) 453.
- [r] J. J. Nakane and H. Kohno, "Angular momentum of phonons and its application to single-spin relaxation", *Phys. Rev. B* 97, (2018) 174403.
- [٤] L. Zhang and Q. Niu, "Angular Momentum of Phonons and the Einstein–De Haas Effect", *Phys. Rev. Lett.* **112**, (2014) 085503.
- [o] C. Kittel, "Interaction of spin waves and ultrasonic waves in ferromagnetic crystals", *Phys. Rev.* 110, (1958) 836.
- [7] R. L. Comstock and R. C. LeCraw, Generation of microwave elastic vibrations in a disk by ferromagnetic resonance, J. Appl. Phys. 34, (1963) 3022.
- [V] S. Streib, H. Keshtgar, and G. E.W. Bauer, "Damping of Magnetization Dynamics by Phonon Pumping", *Phys. Rev. Lett.* 121, (2018) 027202.
- [A] T. Sato, W. Yu, S. Streib, and G. E. W. Bauer, Dynamic Magnetoelastic Boundary Conditions and the Pumping of Phonons, Phys. Rev. B 104, 014403 (2021).
- [4] K. An, A. N. Litvinenko, R. Kohno, and et al., "Coherent longrange transfer of angular momentum between magnon kittel modes by phonons", *Phys. Rev. B* 101, (2020) 060407(R).
- [1] A. Rückriegel and R. A. Duine, "Long-range phonon spin transport in ferromagnet–nonmagnetic insulator heterostructures", *Phys. Rev. Lett.* **124**, (2020) 117201.
- [11] K. An, R. Kohno, A. N. Litvinenko, and et al., "Bright and Dark States of Two Distant Macrospins Strongly Coupled by Phonons", *Phys. Rev. X* 12, (2022) 011060.



مقالهنامه شانزدهمین کنفرانس ماده چگال انجمن فیزیک ایران (دانشگاه شهید بهشتی، ۵ و ۶ بهمن ماه ۱۴۰۱)

### اندازه گیری پهن شدگی دوپلری تابش نابودی پوزیترون بر روی نمونههای زیرکونیای

آلاییده شده با عناصر فلزی

میثاق قمری\* ، مهدی قاسمی فرد،

آزمایشگاه فناوری نانو، مجتمع آموزش عالی اسفراین، اسفراین، ایران

چکیدہ

در این مقاله، پودر اکسید زیرکونیوم (زیرکونیا) خالص و آلاییده شده با یونهای فلزی ( \*Er<sup>3+</sup> Dy<sup>3+</sup> Sm<sup>3+</sup> Pr<sup>3+</sup> و \*Er<sup>3</sup> و \*Eu<sup>3</sup>) به روش همرسوبی سنتز شد. نمونه های آماده شده توسط طیف سنجی پوزیترونی پهن شدگی دوپلری مورد مطالعه قرار گرفتند. اثر عناصر ناخالصی بر روی ترازهای الکترون مغزی زیرکونیا مورد بررسی قرار گرفتند. اثر عناصر ناخالصی بر روی ترازهای الکترون مغزی زیرکونیا مورد بررسی قرار گرفتند. اثر عناصر ناخالصی بر روی ترازهای الکترون مغزی زیرکونیا مورد مطالعه قرار گرفتند. اثر عناصر ناخالصی بر روی ترازهای الکترون مغزی زیرکونیا مورد بررسی قرار گرفت. به کمک روش CDBS می توان ارتباط بین عیوب بلوری و ترازهای الکترونی را حتی در مقادیر کم الکترون مغزی زیرکونیا مورد دارد این این مطالعه قرار داد. نتایج به دست آمده با نتایج دیگر محققان سازگاری دارد اما با کاهش طیف پس زمینه امکان مطالعه دقیق تری فراهم می شود.

لغات كليدي: زيركونيا، طيف سنجي پهنشدگي دوپلري همزماني

# Measurement of Doppler broadening of positron annihilation radiation on zirconia samples doped with metal elements

#### Misagh Ghamari<sup>\*,</sup> Mahdi Ghasemifard,

Department of engineering, Esfarayen Universityy of Technology, Esfarayen, Iran

#### Abstract

In this article, pure and doped zirconium oxide (zirconia) powder with metal ions ( $Pr^{3+}$ ,  $Sm^{3+}$ ,  $Dy^{3+}$ ,  $Er^{3+}$  and  $Eu^{2+}$ ) was synthesized by coprecipitation method. The prepared samples were studied by Doppler broadening positron spectrometry(CDBS). The effect of impurity elements on the electronic structure of the zirconia was investigated. With the help of CDBS method, the relationship between crystal defects and electron band structure can be studied even in small impurity amounts. The obtained results are compatible with the results of other researchers, but by reducing the background spectrum, a more detailed study is possible.

Keywords: Zirconia, Coincidence Doppler broadening spectroscopy



طی چندین سال اخیر استفاده پژوهشگران از روش طيفسنجي پوزيترون در مشخصهيابي ساختار الكتروني و مطالعه عيوب شبكه مواد گسترش يافته است [1,2]. با استفاده از این روش غیرمخرب می توان اطلاعات مهمی از درون مواد بخصوص نقص های بلوری مانند جاهای خالی و بین اتمی را بدست آورد. امروزه ما اطلاعات فراوانی از ساختار مواد به کمک استفاده از روش های طیفسنجی PALS و CDBS بویژه در مواد نیمهرسانا، سرامیکها و پلیمرها داریم [3]. از مهمترين كاربردهاي طيف سنج پوزيتروني بررسي ساختار مواد عايق با ضريب دىالكتريك كم است كه در مدارهاي الكتروني سرعت بالا مورد استفاده قرار می گیرند و همچنین مطالعه عیوب ساختاری در مواد متخلخل و الکتروسرامیکها است [3]. در روش طیف سنجی نابودی پوزیترون، پوزیترونهای پرانرژی تابش شده از یک چشمهٔ پرتوزا مانند <sup>۲۲</sup>Na به سمت نمونه هدایت شده و پس از وارد شدن به ماده، طی برخوردهای کشسان با اتمهای پیرامون خود در ساختار شبکه، به سرعت انرژی جنبشی خود را در مدت زمان چند پیکو ثانیه از دست مىدهند [4]. با كاهش تحركپذيرى پوزيترون احتمال برهمكنش با الكترون به شدت افزایش یافته و احتمال نابودي یا گیر افتادن پوزیترون در یک حالت جایگزیده مانند یکی از نقص های شبکه افزایش پیدا میکند [5]. فرایند نابودی پوزیترون با الکترونهای ترازهای مختلف می تواند مشخصههای نابودی متفاوتی را جهت مطالعات بلورشناسی ارائه دهد. بدلیل پایستگی انرژی و اندازهٔ حرکت طی فرایند نابودی، دو فوتون با انرژی ۵۱۱ keV و در جهت مخالف هم، توليد مىشود. از اين فوتونهاى نابودى مىتوان اطلاعات بسیاری از اندازهٔ حرکت الکترونها و چگالی الکترونها در محل عيوب شبكه بدست أورد.

پوزیترونهای وارد شده به جامد در چند پیکوثانیه انرژی شان را از دست می دهند و به انرژی گرمایی می رسند. این پوزیترونها در جامد پخش شده و با الکترونی از محیط نابود شده و غالباً دو پرتو گامای 511 keV ایجاد می کنند. با توجه به قوانین پایستگی انرژی و اندازه حرکت، مؤلفهٔ طولی اندازهٔ حرکت خطی جفت الکترون- پوزیترون (pL)، باعث

511 keV، به میزان ΔE می شود که از رابطه زیر بدست می-آید[1]:

$$\Delta E = \frac{P_L c}{2} \tag{1}$$

بدلیل ساکن شدن پوزیترونها طی فرایند حرارتی، اندازهٔ حرکت خطی جفت الکترون-پوزیترون را میتوان تماماً مرتبط به الکترون نابود شده دانست. بنابراین جابه جایی دوپلری اطلاعاتی درباره توزیع تکانهی یک بعدی الکترونهایی که پوزیترونها را نابود میکنند به دست میدهد.

زیرکونیا یا دی اکسید زیرکونیوم همزمان دارای سه فاز بلوری مونوکلینیک، تتراگونال و معکبی است [6,7]. این تغییرات فاز باعث تغییر حجم و در نتیجه منجر به عیوب سطحی و حجمی در ساختار ماده می شود. امروزه برای جلوگیری از ایجاد این نوع نقصها از افزودنی هایی اکسیدی مانند Pr2O3 یا Eu2O3 نوع نقصها از افزودنی هایی اکسیدی مانند که این امر باعث چهت پر کردن جاهای خالی استفاده می کنند که این امر باعث پایدار شدن فازهای تتراگونال و مکعبی می شود. اصولاً در تشخیص و تعیین مقدار فازهای تتراگونال و مکعبی در طیف های XRD مشکلاتی وجود دارد که ناشی از روی هم افتادن پیکهای مربوطه است. برای رفع این مشکل مقداری مشخص از یک آنیون را به ماده زیرکونیا اضافه می کنند. در نتیجه پارامترهای شبکه زیرکونیا با توجه به اندازه آنیون تغییر پیدا

در این پژوهش، با استفاده از طیفسنجی اندازهگیری پهن-شدگی دوپلری همزمانی نابودی پوزیترون، تاثیر یونهای فلزی بر ساختار بلوری و عیوب شبکه پودر زیرکونیا مورد بررسی قرار خواهد گرفت.

روشهای تجربی

سنتز نانوپودر زیرکونیا همراه با افزودنی یون فلزی

نمونه ها توسط روش همرسوبی سنتز شدند. مقادیر یکسانی از هر کدام از افزودنی ها به صورت نمک کلرید محلول در آب به محلول پایه اضافه شد. در مجموع شش نمونه که شامل یک



مورد مطالعه طیف سنجی پهن شدگی دوپلری قرار گرفت.

**بحث و بررسی اندازه گیری پهن شدگی دوپلری** به کمک چیدمان شکل 1 پهنشدگی دوپلری ناشی از تغییرات

مولفه طولی اندازه حرکت خطی برای نمونه ها اندازه گیری شد. یکی از اهداف انتخاب این نوع چیدمان کاهش طیف زمینه و ثبت دقیق دنباله طیف ناشی از نابودی پوزیترون در نمونه بود.



**شکل 1** چیدمان آزمایشگاهی اندازهگیری پهن شدگی دوپلری با اعمال شرط همزمانی.

مطابق قوانين پايستگي، مولفه طولي اندازه حركت خطي الكترون-پوزيترون طي فرآيند نابودي پايسته ميماند و اين مقدار تماماً به فوتونهای حاصل از نابودی منتقل میشود. عموماً همه توزيع اندازه حركت خطى فوتونهاى نابودى به الکترونهای نابود شده نسبت داده می شود چرا که پوزیترونها قبل از نابودی به تعادل حرارتی میرسند و سرعت آنها آنقدر کم میشود که میتوان از اندازه حرکت آنها چشم پوشی کرد. تابع توزيع اندازه حركت خطى الكترون تحت تاثير نابودي پوزیترون در محل نقص شبکه بلوری، تغییر میکند. به عبارت دیگر بدلیل کاهش چگالی الکترون در مکان نواقص شبکه بخصوص در جای خالی، تابع توزیع اندازه حرکت ناشی از نابودی پوزیترون با الکترونهای ظرفیت، باریکتر میشود. از طرفی، با جایگزیده شدن پوزیترون در جای خالی و تشکیل شبه اتم پوزیترونیوم، همپوشانی تابع موج پوزیترون با الکترونهای مغزی کاهش پیدا میکند و در نتیجه آهنگ نابودی الکترونهای پرانرژی در ترازهای داخلی افت میکند [9].

انرژی آشکارسازهای مختلف، باعث ایجاد تغییر در شکل طيف خروجي مي گردد. به همين دليل نتايج حاصل از طيف سنج CDBS به صورت نسبي و در مقايسه با يک نمونه مرجع ارائه میشوند. از طرفی تاثیرات تفکیک پذیری انرژی آشکارساز در دنباله طیف ناچیز است ولی آثار آن برای تحلیل دادهها قابل مشاهده خواهد بود. برای بدست آوردن اطلاعاتی از نقش افزودنی های فلزی مختلف بر ساختار شبکه زیرکونیا از طیفهای اندازه گیری شده CDBS، منحنی های اندازه حركت نسبت به فلز خالص آلومينيوم مورد سنجش قرار گرفت. به عبارتی با در نظر گرفتن فلز بسیار خالص آلومینیوم به عنوان مرجع ميتوان كوچكترين تغييرات ايجاد شده در ساختار شبکه به واسطه ناخالصیها را در منحنیهای نسبت اندازه حرکت به وضوح مشاهده کرد [10]. شکل2 منحنی هاي نسبت طيف پهنشدگي همزمان اندازه حركت آلومينيوم خالص به عنوان مرجع نسبت به نمونههای خالص و آلاییده شده زیرکونیا را نشان میهد. همانطور که در شکل2 دیده می-شود، تغییرات در منحنیها بخاطر پوزیترونهایی است که نه تنها با الكترونهاي اتم زيركونيوم و اكسيژن بلكه بوسيله اتم-های ناخالصی هم طی فرایند نابودی از بین میروند. بزرگ-ترین قله که در همه منحنیهای نسبت زیرکونیای آلاییده شده دیده میشود مربوط به سهم الکترونهای 2p اکسیژن در فرآيند نابودي است. اين قله مشخصه، عدم وجود جاي خالي اتم زیرکونیوم که دارای بار منفی است، را نشان میدهد و همين جايگاهها كه باعث برهمكنش پوزيترونها با الكترون-های مغزی (به دام افتادن و نابودی) در سطح این نقایص می $m P_Lpprox \sim$ شود، را تأیید میکند. کاهش اندک قله در حدود سمکن است ( ${\rm Eu}^{2+}$ ممکن است) ممکن است ( ${\rm Eu}^{2+}$ ممکن است به دلیل نابودی الکترونهای 4s اتم زیرکونیوم باشد. بیشتر الكترون هاي نوار 4f فلزات ناخالصي طي فرايند نابودي باعث ايجاد قلهاي بلند در  $P_L pprox 16.21 imes 10^{-3} \ m_0 c$  مي شوند. برآمدگی هایی که در محدود  $P_L \approx 37.56 \times 10^{-3} \; m_0$ تا ظاهر می شود (ممکن است) به  $P_L pprox 43.12 imes 10^{-3} \; m_0 c$ دلیل الکترون،های 3f اتم زیرکونیوم باشد که تحت تأثیر وجود جای خالی اکسیژن قرار گرفته باشد.







شکل2: نسبت طیف CDB نمونههای زیرکونیای آلاییده شده با اتمهای ناخالصی که فلز آلومینیوم خالص به عنوان مرجع انتخاب شده است.

#### 0.130 0.125 2.0: Pr<sup>3+</sup> 2.0: Sm<sup>3+</sup> 2.0: Sm<sup>3+</sup> 0.115 0.110 0.105 0.100 0.41 0.42 0.43 0.44 0.45 0.46 0.47 0.48 0.49 0.50 S-Parameter

شکل 3: تغییرات پارامترهای شکل خطی S و W برای نمونههای زیرکونیای خالص و آلاییده شده.

### نتيجهگيري

نانوپودر زیرکونیا خالص و آلاییده شده با یونهای فلزی <sup>+4</sup> Pr<sup>3+</sup> Sm<sup>3+</sup> ،Eu<sup>2+</sup> ،Sm<sup>3+</sup> با روش هم رسوبی سنتز شد. به کمک طیفسنجی پوزیترونی CDBS تاثیرات یونهای ناخالصی روی ترازهای الکترونی و تغییرات عیوب شبکه مورد مطالعه قرار گرفت. منحنیهای نسبت CDBS، به ویژه در ناحیه اندازه حرکت مربوط به الکترونهای 2p اکسیژن، نشانگر این است که احتمالاً اتمهای ناخالصی در حالت بار الکتریکی بیشتر و شعاع کوچکتر جایگزین شبکه میشوند. مطالعه حاضر نشان میدهد که ساختار منحنیهای نسبت CDBS بطور موثری به شناسایی محل قرارگیری اتم-های ناخالصی در شبکه منجر میشود.

### منابع

[1] Ghasemifard, M., & Ghamari, M. Probing the influence of temperature on defects in oxy-hydroxide ceramics by positron

### پارامترهای شکل خط پهن شدگی دوبلری S و W

برای بدست آوردن اطلاعات بیشتری از نواقص شبکه بلوری بخصوص جای خالی می توان از پارامترهای شکل خط پهن شدگی دوپلری S و W که با دادههای طول عمر پوزیترون مرتبط است، استفاده کرد (شکل3). از پارامترهای S و W می-توان اطلاعاتي از برهمكنش پوزيترونها با الكترونهاي ظرفيت که دارای اندازه حرکت کمتری نسبت به الکترونهای مغزی هستند، استخراج کرد [11]. نرخ افزایش به دام افتادن پوزیترونها در عیب جای خالی که دلیل آن نابودی پوزیترون با الکترونهای ظرفیت است، را می توان از افزایش پارامتر S محاسبه کرد. همانطور که در شکل3 نشان داده شده است، شیب خط در نمونه های زیر کونیای خالص و آلاییده شده منفی است. به بیان دیگر، با افزایش پارامتر W، پارامتر S کاهش می-یابد و این امر نشان دهنده کاهش تعداد پوزیترونهای نابود شده با الكترون های ظرفیت است (و برعكس). تمامی نمونه-های زیرکونیای آلاییده شده دارای عیوب شبکه تقریباً مشابهی هستند. نزدیکی دادههای مربوط به ناخالصیهای <sup>+</sup>Dy<sup>3</sup>، و -Er<sup>3+</sup> ناشی از شعاع اتمی نزدیک این دو عنصر به هم و در نتيجه ايجاد مراكز گيراندازي مشابه است.





nanoparticles synthesized by modified sol gel in gelatin media.", Iranian Journal of Crystallography and Mineralogy 24 (2017) 779-788.

[8] Jucha S., Moskal G., Mikuśkiewicz M. and Stopyra M., "XRD study of Eu\_2O\_3–ZrO\_2 feedstock powders and sintered materials." Acta Physica Polonica A, 130 (2016) 866-868.

[9] Verheyen K., Jardin M. and Almazouzi A.,"Coincidence Doppler broadening spectroscopy in Fe, Fe–C and Fe–Cu after neutron irradiation.", Journal of nuclear materials 351 (2016) 209-215.

[10] Nagai Y., Tang Z., Ohkubo H., Takadate K. and Hasegawa M.,"Elemental analysis of positron affinitive site in materials by coincidence Doppler broadening spectroscopy.", Radiation Physics and Chemistry 68 (2013) 381-386.

[11] Sabelová V., Kršjak V., Kuriplach J., Dai Y. and Slugeň V., "Coincidence Doppler broadening study of Eurofer 97 irradiated in spallation environment.", Journal of Nuclear Materials 458 (2015) 350-354

[2] Chryssos, L., & Hugenschmidt, C.. Novel Data Analysis Tool for the Evaluation of Coincidence Doppler Broadening Spectra of the Positron-Electron Annihilation Line. arXiv preprint arXiv(2022) 2212.01292.

[3] Yu Y., Zhao M., Xu J., Yao M., Guo R., Yu W. and Liu C.,"Measuring impurity content in pipelines by positron annihilation." Measurement and Control 54 (2021) 485-493.

[4] Siegel R.W.,"Positron annihilation spectroscopy." Annual Review of Materials Science, 10 (1980) 393-425.

[5] Chatzikos, V., Mergia, K., Bonny, G., Terentyev, D., Papadakis, D., Pavlou, G. E., & Messoloras, S. Positron annihilation spectroscopy investigation of defects in neutron irradiated tungsten materials. International Journal of Refractory Metals and Hard Materials, (2022) 105, 105838.

[6] Zandiehnadem F., Murray R.A. and Ching W.Y.," Electronic structures of three phases of zirconium oxide." Physica B+C 150 (1998) 19-24.





# بررسی حسگری فلزات سنگین نقاط کوانتومی هسته /پوسته CdTe/CdS ناصری پورتکلو ، سمیه <sup>۱</sup> ؛ ملایی،مهدی <sup>۱</sup> ; خانزاده،محمد <sup>۱</sup> <sup>۱</sup>دانشکاه فیزیک ولی عصر (عج) ، میدان امام خمینی ، رفسنجان

چکیدہ

در این پژوهش نقاط کوانتومی هسته/پوسته CdTe/CdS به روش فوتوشیمیایی سریع و در دمای اتاق با استفاده از تابش فرابنغش سنتز شد آنالیزهای ساختاری PL و UV-Vis و CdTe/CdS از نوع ساختار هسته/ پوسته نوع II است. UV-Vis و UCP تشکیل موفق ساختار هسته/ پوسته را تایید کرد. ساختار هسته/ پوسته نقاط کوانتومی CdTe/CdS از نوع ساختار هسته/ پوسته نوع II است. نقاط کوانتومی CdTe نورتابی لبه نواری با قله نواری در ۵۳۵ نانومتر دارند که پس از پوشیده شدن با پوسته CdS شدت نورتابی آن افزایش چشمگیر داشته و همچنین قله نورتابی بدلیل تشکیل ساختار هسته/ پوسته نوع II به سمت طول موجهای بلندتر انتقال پیدا کرد، . هدف این تحقیق بررسی نقاط کوانتومی هسته/پوسته محینین قله نورتابی بدلیل تشکیل ساختار هسته/ پوسته نوع II به سمت طول موجهای بلندتر انتقال پیدا کرد، . هدف این تحقیق بررسی نقاط کوانتومی هسته/پوسته CdTe/CdS در تشخیص فلزات سنگین است، برای تشخیص یونهای سمی <sup>2+</sup>BH یک روش ساده در محیط آبی ارایه می دهیم. نورتابی نقاط کوانتومی هسته/پوسته CdTe/CdS توسط فلزات سنگین است، برای تشخیص یونهای سمی <sup>2+</sup>BH یک روش ساده در محیط آبی ارایه می دهیم. نورتابی نقاط کوانتومی بر خاموش شدن نورتابی می گذارند.

واژه های کلیدی: CdTe/CdS ، نقاط کوانتومی، هسته/ پوسته و حسگری فلزات سنگین.

#### Investigation of the heavy metal sensing of CdTe/CdS core/shell quantum dots Naseri PourTakallo, Somayeh<sup>1</sup>; Molaei, Mehdi<sup>1</sup>; Khanzadeh, Mohammad<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Vali-e-Asr University, Rafsanjan

#### Abstract

In this research, CdTe/CdS core/shell quantum dots were synthesized by rapid photochemical method and at room temperature using ultraviolet radiation. PL, UV-Vis and XRD structural analyzes confirmed the successful formation of the core/shell structure. The core/shell structure of CdTe/CdS quantum dots is type II core/shell structure. CdTe quantum dots have a band-edge luminescence with a band peak at 535 nm, which after being covered with a CdS shell, its luminescence intensity increased dramatically, and the luminescence peak shifted to longer wavelengths due to the formation of the type II core/shell structure. The aim of this research is to investigate CdTe/CdS core/shell quantum dots in the detection of heavy metals, we present a simple method to detect  $Hg^{+2}$  toxic ions in aqueous medium. The luminescence of CdTe/CdS core/shell quantum dots is quenched by heavy metals and depends on their concentration, mercury ions ( $Hg^{+2}$ ) are a good choice, but other metals have little effect on luminescence quenching.

Keywords: CdTe/CdS, QDs, Core/ Shell, Heavy metal sensing

گروه II-IV است، که می توانند با نورتابی زیاد و شبکه کریستالی منظم در یک محیط آبی سنتز شوند[ ٤ و ٣] و به دلیل گسترده بودن طول موج نور تابی آن در دیودهای گسیل کننده نور، سلول های خورشیدی و هم چنین تصویربرداری بیولوژیکی مورد استفاده قرار گرفته اند [٥-١٠]. از آنجا که اثر سطح و تله های سطحی نقش ویژه ای در ویژگی های نقاط کو انتومی دارد، کنترل و بهبود تله های سطحی نقاط کو انتومی در سال های اخیر نتیجه های جالبی را به همراه

امروزه پژوهش گسترده ای بر نانوکریستال ها و نقاط کوانتومی به دلیل وجود ویژگی های فیزیکی و کاربردهای فراوان از جمله دیودهای گسیل کننده نور، لیزرها، کاربردهای پزشکی، در حال انجام است [1]. دراین بین نانوکریستال های گروه II-IV به دلیل وجود ویژگی های منحصر به فردشان از اهمیت ویژه ای برخوردار هستند [ ۲]. CdTe یک استثنا دربین نقاط کوانتومی

مقدمه



داشته است و کارهای مـتفاوتـی در ایـن زمینه انجام شده است [۱۱–۱۵]. در واقع نقاط كوانتومى اهميت خود را از محصور شدن کوانتومی الکترون ها و حفره های برانگیخته می گیرند. این محصور شدن باعث ایجاد ویژگیهای الکترونیکی و نوری منحصربهفردی می شود که با مشخصات نیمه رساناهای حجیم متفاوت است [۱۴]. بررسی فلزات سنگین در محیط های آبی به دلیل تاثیر خطرناک آنها بر محیط زیست اهمیت ویژه ای یافته است. در این میان جیوه به دلیل اثرات سمی زیست محیطی که دارد به خوبی شناخته شده است، مصرف آب آلوده به جيوه باعث أسيب هاي عصبي و اختلالات جدي مي شود [۱۷]. تشخیص فلزات سمی یا خطرناک برای حفاظت از محیط زیست و ایمن اخيرا است. ر و شن سازی کاملا حسگرهایی که براساس مکانیسم خاموش و روشن شدن نورتابی طراحی شده اند مورد توجه قرار گرفته اند[۱۹و۱۸]. استفاده از نقاط کوانتومی نیمه هادی در طراحی حسگرهای نوری به طیف های تحریک گسترده، خاطر یایداری نور عالی و انعطاف پذیری در تنظیم عملکرد سطح توجه زیادی را به خود جلب کرده است[۲۰و۲۱]. روش آزمایش:

#### مواد

Cadmiumacetatedehydrate(C4H6CdO4\*2H2O), Tellurium powder(%99),Thioglycolicacid(TGA),Sodium borohydride(NaBH4) که از شرکت Merck خرید اری شده اند.

#### روش سنتز نقاط كوانتومى

نقاط کوانتومی CdTe به روش ماکروویو که توسط ملایی و همکاران ارایه شده است سنتز شد [۲۲]. برای سنتز نقاط کوانتومی هسته/پوسته منتز نقاط کوانتومی هسته/پوسته ۰٫۱CdTe/CdS ۰٫۱CdTe/CdS ۰٫۳ میلی لیتر آب دوبار تقطیر شده حل شد، سپس ۷۵ میکرو لیتر TGA به آن اضافه شده و PH محلول توسط NaOH به اندازه ۹ تنظیم شد، در این

مرحله ۲۰ میلی لیتر از CdTe به محلول اضافه شد. و محلول نهایی آماده شده را در معرض تابش لامپ پرفشار جیوه قرار داده و در زمان های مختلف نمونه برداری انجام شد.

### نتايج و بحث

شکل ۱ نورتابی نقاط کوانتومی CdTe/CdS را مشاهده می فرمایید همانطور که مشخص است با رشد پوسته CdS به اطراف CdTe نورتابی رشد چشم گیری داشته است و حداکثر نورتابی در زمان ۱۷ دقیقه می باشد.



شكل ۲ طيف جذب نقاط كوانتومی CdTe/CdS با زمانهای مختلف سنتز می باشد جابجایی لبه های جذب نقاط کوانتومی در توافق با جابجایی قله های گسیل به سمت انرژی های کمتر (طول موج های بلندتر) می باشد. علت انتقال پیدا کردن طول موج نورتابی نقاط کوانتومی CdTe/CdS به سمت طول موج های بلندتر این است که ساختار این نقاط کوانتومی هسته/ پوسته از نوع ساختار هسته/ پوسته II است که باعث این پدیده شده است.





شكل۲ : طیف جذب نقاط كوانتومی CdTe/CdS شكل ۳ الگوی پراش پرتو ایكس نقاط كوانتومی CdTe و CdTe/CdS را نمایش می دهد. مكان ساب قلبه منطبق بر صفحات (۱۱۱)، (۲۲۰) و (۳۱۱) ساختار (JCPDS No.5-0566) و (۳۱۱) ساختار CdTe/CdS است. برای نانو كریستال های CdTe/CdS قله مربوط به صفحه (۱۱۱) به طور واضح با سمت زوایای بزرگتر جابجا شده است كه تایید بزرگتر جابجا شده است كه تایید نقاط كوانتومی CdTe و كاهش ثابت



در این بخش برای تشخیص یونهای سمی جیوه (Hg<sup>+2</sup>) یک روش ساده در آب ارایه می دهیمف از آنجایی که فلورسانس نقاط کوانتومی هسته/پوسته CdTe/CdS توسط فلزات سنگین و وابسته به غلظت آنها خاموش می شود، برای حساسیت فلزات سنگین محلول ۲٫۷ppm از نقاط کوانتومی CdTe/CdS تـهیه شد و یـونـهـای فـلـز ات سنـگین بـا



شکل ٤ : نورتابی نقاط کوانتومی CdTe/CdS همراه با غلظت های مختلف  $Hg^{+2}$ 

پس از افزودن یونهای جمیوه به نقاط کوانتومی CdTe/CdS محلول در آب شدت PL تغییر قابل ملاحظه ای داشته و همینطور با افزایش غلظت جمیوه از (µ۰۰-۱۰M) بتدریج کاهش یافته و در غلظت ۱۰۰M ۲ کاملا خاموش میشود، فلظت ۱۰۰M می کاملا خاموش میشود، درادامه تاثیر فلزات سنگین دیگر را در مقایسه با جمیوه در شکل ۵ مشاهده می کنید.



شکل٥ : سنجش نورتابي براي يونهاي فلزي مختلف



[17]Heydaripour, F., M. Molaei, M. Karimipour, F. Dehghan, and E. Mollahosseini. "Conversion of the yellow to blue emission of CdSe quantum dots (QDs) via ZnSe shell growth." *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* 30, no. 12 (2019): 11378-11382.

[14]Zhang, Rui, Gang Li, and Yue Zhang. "Photochemical synthesis of

CdS-MIL-125 (Ti) with enhanced visible light photocatalytic performance for the selective oxidation of benzyl alcohol to benzaldehyde." *Photochemical & Photobiological Sciences* 16, no. 6 (2017): 996-1002. [\telsFard, Zahra Asgari, and Hossein Dehghani. "Investigation of the effect

of Sr-doped in ZnSe layers to improve photovoltaic characteristics of ZnSe/CdS/CdSe/ZnSe quantum dot sensitized solar cells." *Solar Energy* 184 (2019): 378-390.

[10]Molaei, M., A. R. Bahador, and M. Karimipour. "Green synthesis of

ZnSe and core-shell ZnSe@ ZnS nanocrystals (NCs) using a new, rapid and room temperature photochemical approach." *Journal of Luminescence* 166 (2015): 101-105.

[17]Smith, Andrew M., and Shuming Nie. "Semiconductor nanocrystals: structure, properties, and band gap engineering." Accounts of chemical

research 43, no. 2 (2010): 190-200.

 $[1V]\mbox{Cl.Thomas}$  W., La.Magos, and Ga. J. Myers. "The toxicology of

mercury—current exposures and clinical manifestations." *New England Journal of Medicine* 349, no. 18 (2003): 1731-1737.

[1A]Ra.Gui, An.Xueqin, Su.Hongjuan, Sh.Weiguo, Ch.Zhiyun, and

Wa.Xiaoyong. "A near-infrared-emitting CdTe/CdS core/shell quantum dots-based OFF–ON fluorescence sensor for highly selective and sensitive detection of Cd2+." *Talanta* 94 (2012): 257-262.

[14]Na.Liu, Mu.Ying, Ch.Yi, S.Hubo, H.Sihai, Wa.Mengmeng, Wa.Hui et

al. "Degradation of aqueous synthesized CdTe/ZnS quantum dots in mice:

differential blood kinetics and biodistribution of cadmium and tellurium." *Particle and fibre toxicology* 10, no. 1 (2013): 1-9.

[<sup>Y</sup>·] Saikia, Dilip, Priyanka Dutta, Neelotpal Sen Sarma, and Nirab C.

Adhikary. "CdTe/ZnS core/shell quantum dot-based ultrasensitive PET sensor for selective detection of Hg (II) in aqueous media." *Sensors and* 

Actuators B: Chemical 230 (2016): 149-156.

[<sup>Y</sup>] S.Kini, G.Vinitha, D.K.Suresh , Ch.Santhosh, and D.G.Sajan. "Sensitive detection of mercury using the fluorescence resonance energy transfer between CdTe/CdS quantum dots and Rhodamine 6G." *Journal of Nanoparticle Research* 20, no. 9 (2018): 1-13.

[<sup>YY</sup>] Molaei, M., H. Hasheminejad, and M. Karimipour. "Synthesizing and investigating photoluminescence properties of CdTe and CdTe@ CdS core-shell quantum dots (QDs): a new and simple microwave activated approach for growth of CdS shell around CdTe core." *Electronic Materials Letters* 11, no. 1 (2015): 7-12. نتيجه گيري

نقاط کوانتومی CdTe/CdS به روش سریع فوتوشیمیایی سنتز شد. ساختار هسته/ پوسته CdTe/CdS از نوع ساختار هسته/ پوسته نوع II است. آنالیز های -PL,UV پوسته نوع II است. آنالیز های Vis,XRD دور Vis,XRD را تایید کرد. نقاط کوانتومی CdTe/CdS حسگر خوبی برای فلز جیوه می باشند، اما فلزات دیگر تاثیر کمی بر نورتابی دارند.

مرجعها

[1] Farahmandzadeh, Farzad, Mehdi Molaci, Hassan Alehdaghi, Masoud Karimipour, and Alireza Shamsi. "Effect of concentration and shell thickness on the optical behavior of aqueous CdTe/ZnSe core/shell quantum dots (QDs) exposed to ionizing radiation." *Luminescence* (2022).
[Y] Esteves, Ana Catarina C., and Tito Trindade. "Synthetic studies on

II/VI semiconductor quantum dots." Current Opinion in Solid State and Materials Science 6, no. 4 (2002): 347-353.

[r] Ingert, Dorothe, Nicholas Feltin, Laurent Levy, Pierre Gouzerh, and Marie-Paule Pileni. "CdTe Quantum Dots Obtained by Using Colloidal Self-Assemblies as Templates." *Advanced Materials* 11, no. 3 (1999): 220-223.

[£] Sheng, Zonghai, Heyou Han, Xiaofeng Hu, and Chen Chi. "One-step growth of high luminescence CdTe quantum dots with low cytotoxicity in ambient atmospheric conditions." *Dalton Transactions* 39, no. 30 (2010): 7017-7020.

[o] Marandi, Maziar, Bentolhoda Emrani, and Hakimeh Zare. "Synthesis

of highly luminescent CdTe/CdS core-shell nanocrystals by optimization of the core and shell growth parameters." *Optical Materials* 69 (2017): 358-366.

[1] Moulick, Amitava, Iva Blazkova, Vedran Milosavljevic, Zdenka Fohlerova, Jaromir Hubalek, Pavel Kopel, Marketa Vaculovicova, Vojtech Adam, and Rene Kizek. "Application of CdTe/ZnSe quantum dots in in vitro imaging of chicken tissue and embryo." *Photochemistry and Photobiology* 91, no. 2 (2015): 417-423.

[v] Samadpour, Mahmoud, A. Irajizad, Nima Taghavinia, and Morteza Molaei. "A new structure to increase the photostability of CdTe quantum dot sensitized solar cells." *Journal of Physics D: Applied Physics* 44, no. 4 (2011): 045103.

[A] Liu, Xiangming, Jintao Tian, Jinhui Dai, and Xin Wang. "Aqueous synthesis of thiol-capped CdTe quantum dots and its photoluminescence enhancement via room temperature treatment with alkyl chain diamines." *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 57 (2014): 56-62.

[4] Hien, N. T., T. T. K. Chi, N. D. Vinh, H. T. Van, L. D. Thanh, P. V.

Do, V. P. Tuyen, and N. X. Ca. "Synthesis, characterization and the photoinduced electron-transfer energetics of CdTe/CdSe type-II core/shell quantum dots." *Journal of Luminescence* 217 (2020): 116822.

[1.] Pourjafari, S., M. Molaei, E. Saievar-Iranizad, Z. Dehghani, and M. H.

Majlesara. "Investigation of photoluminescence and non-linear optical properties of CdTe nanocrystals." *Synthesis and Reactivity in Inorganic, Metal-Organic, and Nano-Metal Chemistry* 42, no. 4 (2012): 542-547.

[11]Molaei, M., E. Saievar Iranizad, M. Marandi, N. Taghavinia, and R.

Amrollahi. "Synthesis of CdS nanocrystals by a microwave activated method and investigation of the photoluminescence and electroluminescence properties." *Applied surface science* 257, no. 23 (2011): 9796-9801.



# بازتاب آندریو حساس به زاویه فرود و القاء ابررسانایی اسپین سه-تایی بر روی سطح عایق توپولوژیک

مرتضى صالحي

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

چکیدہ

فرومغناطیسی همصفحه مکان مخروطهای دیراک بر روی سطح عایق توپولوژیک در فضای وارون را تغییر میدهد. این تغییر مکان منجر به ناهمسانگردی نسبت به زاویه فرود در بازتاب و ترابرد از یک اتصال فرومغناطیس-ابررسانا خواهد شد. به دلیل اینکه عایقهای توپولوژیک دارای قویترین برهمکنش اسپین-مارا هستند، این ناهمسانگردی منجر به تغییر پیکربندی اسپینی نیز می شود. 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 القاء ابررسانایی اسپین سه-تایی خواهد شد. همچنین، به عنوان یک اثر قابل مشاهده در آزمایشگاه ،یک جریان غیرعادی هال موازی با فصل مشترک شارش پیدا خواهد کرد.

واژه های کلیدی: عایق توپولوژیک، فرومغناطیس هم صفحه، بازتاب آندریو، ابررسانایی اسپین سه-تایی، جریان هال

# Angle-sensitive Andreev reflection and induced spin-triplet superconductivity on the surface of topological insulators

#### Morteza Salehi

Department of Physics, Bu-Ali Sina University, Hamadan, 65178, Iran.

#### Abstract

In-plane ferromagnetism tunes the Dirac cone's location of topological insulators in the k-space. This change leads to an anisotropy with respect to the incoming angle in reflection and transmission on the ferromagnetsuperconductor junction. Since topological insulators have strong spin-orbit interaction, this anisotropy changes the spin configuration. We theoretically show a similar effect for Andreev reflection occurs at the ferromagnetsuperconductor junction, which induces spin-triplet superconductivity. As an experimental signature, we find an anomalous Hall current flows parallel to the interface.

*Keywords:* Topological Insulators, in-plane ferrmagnetism, Andreev Reflection, spin-triplet superconductivyt, anomalous Hall current.

PACS No. 72, 74, 68

موضعی بر روی سطح و مرز می شود.رابطه پاشندگی این حالتهای سطحی مانند فرمیونهای دیراک در گرافین خطی است با این تفاوت که در گرافین اندازه حرکت به درجه آزادی شبه اسپین ( ناشی از تقارن زیر شبکه ) جفت شده است در صورتی که در عایق های توپولوژیک این جفت شدگی بین اندازه حرکت و اسپین واقعی

عایق های توپولوژیک در تلاش برای مطالعه برهم کنش اسپین-مدار بر روی گرافین پیش بینی شدند[۱]. عایق های توپولوژیک دارای گاف انرژی با علامت وارون در کپه خود هستند که با توجه به تناظر کپه- لبه منجر به حالت های بدون گاف و مقاوم در برابر اختلال های

مقدمه



فرمیونها رخ میدهد. عایقهای توپولوژیک سه بعدی کمی بعد از کشف عایقهای توپولوژیک دو بعدی در موادی مانند Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> پیشبینی و کشف شدند[۲]. القاء مغناطش یا ابررسانایی به این حالتهای سطحی با مجاورت آنها با الکترودهای فرومغناطیس یا ابررسانا امکان پذیر است. به همین دلیل، عایق توپولوژیک یک بستر مناسب برای مطالعه این دو پدیده با برهمکنش قوی اسپین-مدار را فراهم کرده است.

در این تحقیق ما نشان میدهیم که اگر فرومغناطیس هم صفحه مولفهای عمود بر فصل مشترک در یک اتصال فرومغناطیس – ابررسانا داشته باشد، آنگاه احتمال بازتاب آندریو به زاویه فرود ذره وابستگی ناهمسانگرد خواهد داشت. در نتیجه راستای انتشار فرمیونهای دیراک در بازتاب از این فصل مشترک دچار تغییر خواهد شد. به دلیل برهمکنش قوی، این ناهمسانگردی جفت شدگی با اسپین سه تایی را در ناحیه فرومغناطیس القاء خواهد کرد و منجره به شارش یک جریان هال غیرعادی موازی با فصل مشترک اتصال خواهد شد.

چارچوب تئورى:

هامیلتونی موثر حاکم بر حرکت فرمیونهای دیراک در سطح یک عایق توپولوژیک در حضور فرومغناطیسی با رابطه زیر توصیف میشود[۲، ۳]،

 $H_e(k) = \hbar v_F (\sigma \times k). \hat{e}_z - (m.\sigma)$  (۱) که  $\sigma$  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 f = 1 قرار میدهیم. در حضور ابررسانایی و تقارن الکترون-حفره ناشی از حضور ابررسانایی موج S در ماده، شبهذرات الکترون-گونه و حفره-گونه از معادله بو گولیوبوف-دوژن که به صورت زیر نوشته می شود، تبعیت خواهند کرد[3]،

 $\begin{pmatrix} H_e(k) - \mu & \Delta \\ \Delta^* & \mu - H_e(-k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ (٢)  $\sum_{v=1}^{\infty} \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{i} \sum_{v=1}^{n} \frac{1}{i} \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{i} \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{i} \sum_{v=1}^{n} \frac{1}{i} \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{i} \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{i} \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{i} \sum_{v=1}^{n} \frac{1}{i}$ 

ویژه مقادیر انرژی ذرات الکترون-گونه و حفره-گونه به صورت زیر بدست میآیند،



نمکل ۱- جدا شدن مخروطهای دیراک الکترون-گونه و حفره-گونه در فضای اندازه حرکت در حضور فرومغناطیسی هم صفحه. در حضور m<sub>x</sub> مقدار این جداشدگی به اندازه 2m<sub>x</sub> خواهد بود [۲].

$$\varepsilon_{e} = \pm \sqrt{\left(k_{x} + m_{y}\right)^{2} + \left(k_{y} - m_{x}\right)^{2}} - \mu$$

$$\varepsilon_{h} = \pm \sqrt{\left(k_{x} - m_{y}\right)^{2} + \left(k_{y} + m_{x}\right)^{2}} + \mu$$
(\vec{v})

رابطه (۳) نشان میدهد که در حضور فرومغناطیسی همصفحه، مخروطهای دیراک الکترون-گونه و حفره-گونه در فضای اندازه حرکت به اندازه  $\sqrt{m_x^2 + m_y^2}$ 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.

اگر یک اتصال مانند قسمت (الف) 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 رلام) بقاء خواهند داشت. یک بازتاب آندریو برای یک ذره الکترون-گونه در فضای اندازه حرکت در قسمت (ب) شکل ۲ در موقعیت ۵ 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





نسکل ۲ – الف) ساختار اتصالی فرومغناطیس ابررسانا در آزمایشگاه با استفاده از دو الکترود فرومغناطیسی و ابرر سانایی را بر روی سطح ابرر سانا القاء میکنیم. ب) فرآیند پراکندگی در فضای اندازه حرکت برای بازتاب آندریو در حد بالستیک، فرمیون فرودی در موقعیت B با را ستای انتشار  $\theta$  و حفره های بازتابیده متناظر در دو موقعیت B برای بازتاب آینه ای و ra برای بازتاب بازگشتی نشان داده شاهاند. ج) فرآیند پراکندگی درفضای واقعی برای بازتاب آندریو نشان داده شده در قسمت (ب).

آبی رنگ ( که نشان دهنده مکان ذره با انرژی 3 بر روی مخروط دیراک از زاویه بالا است) به سمت مکان قرار گیری ذره کشیده است و نشان دهنده انتشار ذره با زاویه  $\theta$  نسبت به محور عمود بر اتصال است. حفره بازتابیده، که با دایره سفید رنگ نشان داده شده است، نیز دارای انرژی 3 است و در صورتی پایدار خواهد بود که بتواند یک جای خالی بر روی دایره قرمز رنگ ( نشان دهنده مکان مغرهها بر روی مخروط دیراک حفره-گونه ) برای خود بیابد. اگر این جای خالی در نوار ظرفیت قرار داشته باشد، بازتاب متناظر با موقعیت  $a_{\rm S}$  آینه کواهد بود و اگر در نوار رسانش قرار داشته باشد بازتاب متناظر با موقعیت r بازگشتی خواهد بود. فرآیند بازتاب آندریو توضیح داده شده در بالا در فضای حقیقی در قسمت (ج) شکل ۲ نشان داده است. این اثر بخوبی نشان می دهند که بین اسپین و اندازه حرکت از سوی دیگر منجر به تغییر مسیر حرکت الکترون و حفره در بازتاب آندریو می شود.

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 با موقعیت an بازتاب کند.

ضرایب بازتاب نرمال، r، و بازتاب آندریو، r<sub>A</sub>، و همچنین احتمال عبور را با استفاده از پیوستگی تابع موج کل بر روی فصل مشترک میتوان بدست آورد.

 $\Psi_{e}^{+} + r\Psi_{e}^{-} + r_{A}\Psi_{h}^{-} = t_{e}\Psi_{e}^{s+} + t_{h}\Psi_{h}^{s-}$ (٤)

این ضرایب برای محاسبه جریان عبوری از فصل مشترک مناسب هستند. در بخش نتایج خواهیم دید که ناهمسانگردی در ضرایب بازتاب منجر به شارش یک جریان عرضی هال غیرعادی موازی با فصل مشترک اتصال خواهد شد. بازتاب آندریو از سویی منجر به ایجاد یک همبستگی بین الکترون فرودی و حفره بازگشتی خواهد شد. به دلیل برهم کنش قوی اسپین-مدار در سطح عایق توپولوژیک راستای انتشار ذره به اسپین آن جفت شده است. ناهمسانگردی در راستای انتشار منجر به تغییر راستای اسپین الکترون فرودی و حفره بازگشتی خواهد شد و این منجر به القاء ابررسانایی اسپین سه-تایی در ناحیه فرومغناطیس خواهد شد. برای نشان دادن این موضوع ما روش تابع گرین را برگزیدیم [۲، ۵]. با استفاده از توابع موج ذرات فرودی از هر دو سمت اتصال تابع گرین به صورت زیر تعریف می شود،

$$G^{R}(x,x',E) = \sum_{\nu} \frac{\langle x|\nu\rangle \langle \nu|x'\rangle}{E^{-\varepsilon_{\nu}+i\eta}}$$
(\$)

که < v| ویژه توابع رابطه (۲) است. بعد از اعمال شرایط مرزی با استفاده از تمدید تحلیلی،  $G^R(E + i\delta) \rightarrow G(i\omega_n)$ ، می توانیم تابع گرین ماتسوبارا را در ناحیه فرومغناطیس را به صورت زیر بدست آوریم،

$$G = \begin{bmatrix} G_{\uparrow\uparrow} & G_{\uparrow\downarrow} & F_{\uparrow\uparrow} & F_{\uparrow\downarrow} \\ G_{\downarrow\uparrow} & G_{\downarrow\downarrow} & F_{\downarrow\uparrow} & F_{\downarrow\downarrow} \\ \hat{F}_{\uparrow\uparrow} & \hat{F}_{\uparrow\downarrow} & \hat{G}_{\uparrow\uparrow} & \hat{G}_{\uparrow\downarrow} \\ \hat{F}_{\downarrow\uparrow} & \hat{F}_{\downarrow\downarrow} & \hat{G}_{\downarrow\uparrow} & \hat{G}_{\downarrow\downarrow} \end{bmatrix}$$
(7)

و با استفاده از رابطه (٦) دامنه ابررسانایی اسپین سه تایی القاء شده به صورت زیر بدست می آید، (۲ ۲ سره) م $\hat{f} + (27 + 200) \hat{h}$ 

$$F_{\uparrow\uparrow}^{odd} = \frac{F_{\uparrow\uparrow}(\omega_n.x.x) + F_{\uparrow\uparrow}(-\omega_n.x.x)}{2} \tag{V}$$
c, let as it in the set of the s



شکل ۳ – ناهمسانگردی بازتاب آندریو نسبت به زاویه فرود ذره بر حسب انرژی. گاف نرژی غیر مستقیم، محو شدن اثر فرمیونهای مایورنا و عدم تعادل در جریان عرضی از نتایج این ناهمسانگردی است. این شکل برای مm<sub>x</sub> = 0.2 Δ رسم شده است.

نتايج

در حضور فرومغناطیس همصفحه که دارای مولفه عمود بر فصل مشترک اتصال فرومغناطیس و ابررسانا باشد، بازتابهای آندریو و نرمال نسبت به راستای انتشار ذره ناهمسانگرد خواهند بود. لذا شبه ذراتی که در راستاهای متقارن نسبت به محور عمود بر فصل مشترک به اتصال برخورد مي كنند با احتمالهاي متفاوتي مواجه خواهند شد. در شکل ۳ احتمال بازتاب آندریو بر حسب زاویه فرودی ذره الکترون–گونه رسم شده است. برای سادگی تنها مولفه  $m_x$ در نظر گرفته شده است. یک گاف غیر مستقیم ناشی از عدم  $0.2\Delta_0$ همپوشانی مخروطهای دیراک تا  $m_{\chi}$  در نمودار مشخص arepsilonاست. علاوه بر آن در انرژهای بالاتر احتمال بازتاب آندریو کاملا وابسته به راستای فرود ذره است. این وابستگی به زاویه شارش یک جریان غیرعادی هال خواهد شد که از رابطه زیر محاسبه می شود،  $G_{H} = \int_{-\pi}^{\frac{\pi}{2}} \left( (1 - |r|^{2}) Sin\theta + |r_{A}|^{2} sin\varphi \right) d\theta$  $(\Lambda)$ از طرف دیگر در رابطه (۷) نشان دادیم که می توان دامنه ابررسانایی ا سپین سه تایی را نیز با ا ستفاده از تابع گرین مات سوبارا محا سبه

کرد. در شکل ٤ مقدار این دامنه در ناحیه فرومغناطیسی نشان داده شده است. در نتیجه حضور جریان هال غیرعادی و ابررسانایی



شکل ۴- القاء ابرر سانایی اسپین سه تایی در ناحبه فرومغناطیس. قسمت موهومی دامنه بهنجار ابررسانایی اسپین سه تایی با م $\Delta_0 \ m_x = 0.4 \ M$  رسم شده /ست.

اسپین سه تایی که هر دو ناشی از بازتاب ناهمسانگرد آندریو است ما را به این نتیجه رهنمون می کند که بین جریان هال غیر عادی در اتصالهای ابررسانا-فرومغناطیس و القاء ابررسانایی اسپین سه تایی رابطه مستقیم وجود دارد. از آنجاییکه آشکارسازی ابررسانایی اسپین سه تایی نسبت به اندازه گیری جریان هال غیر عادی موضوعی پیچیده تر است. حضور جریان هال غیر عادی را به عنوان نشانهای از ابررسانایی اسپین سه تایی می توان در نظر گرفت.

#### جمعبندى

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 ناهمسانگرد، جریان عرضی هال غیرعادی و ابررسانایی اسپین سه تایی خواهیم داشت. مرجعها

- [1] C. L. Kane and E. J. Mele *Phys. Rev. Lett.* **95**, 146802 (2005).
- [Y] M. Z. Hasan and C. L. Kane, Rev .Mod. Phys. 82, 3045 (2010).
- [<sup>r</sup>] D. Hsieh, *et al* Nature **460**, 1101 (2009).
- [<sup>\*</sup>] W. L. McMillan, Phys. Rev. **175**, 559 (1968).
- [<sup>Δ</sup>] B. Lu and Y. Tanaka, arXiv:1512.00916 (2015).





## مطالعه خواص اپتیکی یک شبهبلور فوتونی اوکتوناچی در حضور نانولایههای گرافن

محمدپور، على ٰ ؛ بروستاني، جمال ٰ؛ سلطاني والا، على ٰ

<sup>ا</sup>دانشک*ده* فیزیک دانشگاه تبریز ، بلوار ۲۹ بهمن، دانشگاه تبریز، تبریز

چکیدہ

در این مقاله با در نظر گرفتن یک شبه بلور فوتونی اوکتوناچی، و به کارگیری روش ماتریس انتقال طیفهای بازتاب و جذب محاسبه شده و موقعیت نقاط استثنائی و گاف نواری ساختار بدست آمده است. با تغییر ضخامت لایه ها، یک رفتار متناوب برای طیف بازتاب به ازای بسامد موج فرودی در محدوده تراهرتز بدست آمده و همچنین با افزایش مقادیر پتانسیل شیمیایی، برای ضریب جذب پدیده انتقال به آبی رخ داده و پهنای نوار به طور تدریجی کاهش یافته است. مقدار پتانسیل شیمیایی بهینه با مطالعه طیف جذب بر حسب تغییرات بسامد و زاویه فرود موج بدست آمده است و نهایتاً، با محاسبه پدیده جابه جایی حانچی ملاحظه می شود که هرچه مقدار پتانسیل شیمیایی بزرگتر باشد، مقدار کمینه جابه جایی جانبی، کاهش یافته و به سمت زوایای کوچکتر میل می واژه های کلیدی: اوکتوناچی، بلور فوتونی، گرافن، گؤس هانچان ماتریس انتقال

### Study of Optical Properties of Octonacci Photonic Quasi-Crystal in the Presence of Graphene Nanolayers

#### Mohammadpour, Ali<sup>1</sup>; Barvestani, Jamal<sup>1</sup>; Soltani Vala, Ali<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Faculty of Physics, University of Tabriz, Tabriz

#### Abstract

In this article, by considering an Octonacci photonic crystal, and using the transfer matrix method, the reflection and absorption spectra are calculated and the position of the exceptional points and the bandgap of the structure have been obtained. By changing the thickness of the layers, a periodic behavior is obtained for the reflection spectrum for the frequency of the incident wave in the terahertz range, and also with the increase in the chemical potential values, the blue-shift phenomenon has been occurred for the absorption coefficient and the bandwidth decreases gradually. By studying the absorption spectrum in terms of frequency changes and wave incident angle, the optimal chemical potential value has been obtained and finally, by calculating the Goos-Hänchen lateral displacement phenomenon, it is observed that the larger the chemical potential, the minimum lateral displacement decreases and tends to smaller angles.

Keywords: Octonacci, Photonic crystal, Graphene, Goos-Hänchen, Transfer matrix

PACS No. 42

اتلاف کم میباشد. با توجه به هندسه و ثابتهای دیالکتریک مواد به کار رفته در یک بلور فوتونی، میتوان گافهای نواری فوتونیک طراحی کرد و ساخت که از انتشار نور در جهات مشخص با انرژیهای معین جلوگیری کنند [1]. با توجه به نحوه قرارگیری و نظم خاص به کار رفته در چیدمان لایههای دیالکتریک مختلف

تاریخچه مطالعات اولیه در خصوص بلورهای فوتونی نشان میدهد که در این مواد، الکترونها با امواج الکترومغناطیسی جایگزین شدهاند. تعریف مشخصه بلور فوتونیک، دورهای بودن ماده دیالکتریک در امتداد یک یا چند محور معین در ابعاد مختلف، با

مقدمه



تشکیل دهنده ساختار، شبه بلورهای فوتونی با سریهای متفاوتی نظير فيبوناچي، اوكتوناچي، تيومورس و ... تعريف مي شوند [2]. جابهجایی جانبی موسوم به اثر گؤس-هانچن که برای اولین بار در سال ۱۹۴۷ گزارش شد [3]، بازتاب داخلی کلی را بین پرتو تابیده و پرتو بازتاب شده در مرز میان دو محیط نشان میدهد. در حالت کلی، مقدار این جابهجایی کوچکتر از عرض باریکه تابیده شده است، اما در ساختارهای لایهای و بلورهای فوتونیکی مقدار قابل توجهی داشته و در حضور نقص در این ساختارها، مقدار این جابهجایی به شدت افزایش مییابد. گرافن تک لایه، شبکه لانه زنبوری از اتمهای کربن است که در یک ساختار دوبُعدی، در دسته نیمههادیها قرار دارد. در ناحیه بسامدی تراهرتز، گرافن دارای اتلاف بسيار كم نسبت به ساير فلزات بوده، بنابراين با كنترل خواص اپتیکی مرتبط با نانولایه گرافن نظیر پتانسیل شیمیایی، رسانندگی سطحي و ... و همچنين تزويج مناسب نور فرودي و تغيير پارامترهاي مختلف مربوط به ساختار بلور فوتوني مانند ضخامت لايهها، زاويه نور فرودي، شاخص شكست لايهها و ... مي توان ويژگيهاي اپتيكي سامانه را مورد مطالعه قرار داد [4, 5]. در این مقاله، با در نظر گرفتن یک شبه بلور فوتونی یک بُعدی اوکتوناچی در حضور لایههای گرافن، طیفهای بازتاب و جذب به ازای مقادیر پتانسیلهای شیمیایی برابر با مقادیر صفر و غیرصفر، بدست آمده و موقعیت گاف نواري و نقاط استثنائي مربوط به ساختار به ازاي بسامدهاي مشخص، در ناحیه تراهرتز شناسایی شده است. به ازای یک مقدار پتانسیل شيميايي غيرصفر، ضخامت لايههاي تشكيل دهنده بلور فوتوني تغيير داده شده است و ملاحظه شده است که با افزایش ضخامت لایهای با شاخص شکست بالاتر، یک رفتار متناوب وجود داشته و رفتار باریکه بازتاب روبه جلو و روبه عقب با یکدیگر قابل مقایسه است. با بررسی تغییرات پارامتر جذب بر حسب تغییرات پتانسیل شیمیایی به ازای بسامدهای مختلف، ملاحظه کردیم که با افزایش مقادیر پتانسیل شیمیایی گرافن، برای پیکهای مربوطه پدیده انتقال به آبی رخ داده و کیفیت میزان جذب در سامانه، وابسته به رسانندگی سطحی گرافن بوده که آن مستقیماً متأثر از مقدار پتانسیل شیمیایی مربوط به گرافن میباشد. در قدم بعدی، با کاهش مقدار پتانسیل شیمیایی، ملاحظه کردیم که، مقدار بیشینه جذب در زوایای فرود

بزرگتری رخ داده و مقدار پتانسیل شیمیایی بهینه گزارش شده است. نهایتاً، با مطالعه پدیده جابهجایی جانبی گؤس-هانچن به ازای تغییر زوایای موج الکترومغناطیسی فرودی، مشاهده کردیم که در محدوده زاویهای خاصی، هر چه مقدار پتانسیل شیمیایی افزایش مییابد، مقدار کمینه جابهجایی جانبی کاهش یافته و به سمت زوایای کوچکتر میل میکند.



### نگره و الگوی ساختار

مطابق شکل ۱، یک ساختار شبه بلور فوتونی با سری اوکتوناچی از مرتبه چهار را در نظر می گیریم، به طوری که سمت چپ و سمت راست ساختار نیز بلورهای فوتونی متناوب از مرتبه چهار قرار گرفته اند. لایه های تشکیل دهنده ساختار که آن ها را با c و d مشخص کردهایم، به ترتیب دارای شاخصهای شکست  $n_c = 8/0$  (لایه مصنوعي) و nd =۱ (لايه هوا) ميباشند. ضخامت لايهها در ابعاد میکرومتر بوده و در ابتدا به ترتیب برابر ۱/۵ و ۱۲/۵ میکرومتر در نظر گرفته شده است. نانولایههای گرافن (g)، که در میان لایههای دیالکتریک دیگر جانمایی شدهاند، در دمای T=۳۰۰k درجه کلوین، دارای ضخامت d<sub>g</sub> =۰/۳۴ نانومتر بوده و در ابتدا مقدار یتانسیل شیمیایی آن برابر  $\mu_{\rm c}=$ ۰/۳۹۵ در نظر گرفته شده است. ضریب گذردهی گرافن با رابطه  $\sigma_{\rm g} = 1 + i \frac{\sigma_{\rm g}}{\omega_{\rm E} d_{\rm g}}$  بیان میشود، که در آن ضريب گذردهي الكتريكي خلأ برابر با: <sup>١٢-</sup> ٨٠ × ٨٠ = ٤ در نظر گرفته میشود. رسانندگی سطحی  $\sigma_{
m g}(\omega)$  با توجه به روابط کوبو [6, 7]، متشکل از دو جمله رسانندگی سطحی میان نواری و درون نواری بوده که با رابطه (۱)، تعریف می شوند:

$$\begin{split} \sigma_{g}(\boldsymbol{\omega}) &= \sigma_{g} \quad \overset{(\boldsymbol{\omega}) \neq (\boldsymbol{\omega}) \neq \sigma_{g}}{(\boldsymbol{\omega})} + \sigma_{g} \quad \overset{(\boldsymbol{\omega}) \neq (\boldsymbol{\omega})}{(\boldsymbol{\omega})} \quad (1) \\ \sigma_{g} \quad \overset{(\boldsymbol{\omega}) \neq (\boldsymbol{\omega}) \neq (\boldsymbol{\omega}) \neq (\boldsymbol{\omega}) \neq (\boldsymbol{\omega}) = \boldsymbol{\omega}_{\tau h}^{\tau} \left\{ \frac{\mathbf{i}^{\tau} \mathbf{k}_{B} T}{\hbar \boldsymbol{\omega}} \ln(\tau \cosh(\frac{\mu_{c}}{\tau \mathbf{k}_{B} T})) \right\} \\ \sigma_{g} \quad \overset{(\boldsymbol{\omega}) \neq (\boldsymbol{\omega}) \neq (\boldsymbol{\omega})$$

ڎٳؿڲٳڋ بيهييي

> در این رابطه،  $k_{\rm B}$  ثابت بولتزمن،  $\hbar$  ثابت پلانک کاهشیافته، 9 بار الکترون و  $\omega$  بسامد زاویه ای می باشد. با استفاده از روش ماتریس انتقال [8, 9]، مطابق رابطه (۲)، مؤلفه های عبور T و بازتاب R روبه جلو و روبه عقب قابل محاسبه بوده و از آنجا با توجه به رابطه A = 1 - T - R، مقدار ضریب جذب بدست می آید.

$$\begin{pmatrix} E_{,} \\ H_{,} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} E_{n} \\ H_{n} \end{pmatrix} ; M = \sum_{j=1}^{n} M_{j}$$

$$M = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ \cos \delta_{j} & -\frac{i}{n_{j}} \sin \delta_{j} \end{pmatrix}$$

$$(\Upsilon)$$

 $\mathbf{M}_{j} = \begin{pmatrix} \mathbf{m}_{rr} & \mathbf{m}_{rr} \end{pmatrix}^{=} \begin{pmatrix} -i\mathbf{n}_{j}\sin\delta_{j} & \cos\delta_{j} \end{pmatrix}$  $\sum_{k=1}^{j} \sum_{k=1}^{j} \sum_$ 

### بحث و نتایج محاسبات

بسامد موج الکترومغناطیسی به کار رفته در محدوده تراهرتز بوده و در ابتدا موج به صورت عمود وارد ساختار می گردد. در ابتدای بحث، طبق شکل ۲الف، ضرایب بازتاب و جذب برای حالتی که مقدار پتانسیل شیمیایی مربوط به گرافن، برابر مقدار غیرصفر مقدار پتانسیل شیمیایی مرابط به گرافن، برابر مقدار خیرصفر محدوده بسامدی محاسبه شده است. ملاحظه مینماییم که در محدوده بسامدی مشخص، گاف نواری وجود داشته و در بخش اعظمی از محدوده بسامدی مدنظر، مقدار بازتاب برابر با مقدار ۱ بوده که این منجر به تشدید تداخل موج بازتابی که از پراکندگی براگ بدست آمده است، خواهد شد. به ازای پتانسیل شیمیایی برابر

با مقدار صفر ۰۰ = .µ، طبق شکل ۲ب، مقدار ضریب بازتاب در محدودههای بسامدی بزرگتر از مقدار ۱۰ تراهرتز، از مقدار ۱ فراتر رفته و ضریب جذب دارای مقادیری منفی می باشد.



شکل ۲. صرایب بازناب و جدب بر حسب تعییرات بسامد. برای مفادیر پانسیل شیمیایی الف) 400 / ۹۰ – . µ . ب) ۴۰ – . µ

حال تغییرات ضخامت لایههای c و b را بر حسب تغییرات بسامد برای ضرایب بازتاب روبه جلو و روبه عقب مورد مطالعه قرار می دهیم. ابتدا با تغییر لایه ای با ضریب شکست بالاتر یعنی c، طبق شکل ۳الف و ب، ملاحظه می کنیم که، برای هر دو باریکه بازتاب، یک رفتار تناوبی بر حسب تغییر ضخامت رخ داده است و برای بازتاب روبه جلو مقدار بازتاب مقادیر بزرگتری در قیاس با باریکه روبه عقب دارد، که این برای شکل ۳ج و د مربوط به لایه b هم صادق بوده و در هر دو حالت مربوط به باریکه روبه عقب، با افزایش مقدار بسامد، مقادیر بازتاب نیز رفته رفته افزایش یافته است.





شکل ۳: تغییر ضخامت بر حسب بسامد. به ترتیب بازتاب روبه جلو و روبه عقب: (الفوب)لایه c. (جود)لایه d.

حال با مطالعه تغییرات ضریب جذب بر حسب تغییرات پتانسیل شیمیایی، طبق شکل ۴الف، ملاحظه میکنیم که با افزایش مقدار پتانسیل شیمیایی، برای ناحیه مربوط به جذب مطلوب در سامانه، پدیده انتقال به آبی رخ داده است و پهنای نوار به طور تدریجی کاهش یافته است.



بسامد. ب) به ازای تغییرات زاویه فرود موج.

طبق شکل ۴ب، در محدوده زوایای فرود مشخصی از موج، ملاحظه میکنیم که با کاهش مقدار پتانسیل شیمیایی، مقدار بیشینه جذب در زوایای بزرگتری رخ داده است. با مقایسه شکلهای ۴ الف و ب، در مییابیم که مقدار پتانسیل شیمیایی مطلوب برای ساختار مدنظر در محدوده ۲/۰ تا ۲/۰ بوده و مقدار تقریبی ایده آل، در پتانسیل شیمیایی ۳۹۵/۰ = م رخ میدهد. در نهایت، با محاسبه تغییرات جابهجایی جانبی گؤس-هانچن برای باریکه بازتابی، بر حسب تغییرات پتانسیل شیمیایی در محدوده زاویهای مشخص موج فرودی، ملاحظه میکنیم که، هر چه مقدار پتانسیل شیمیایی بزرگتر باشد، مقدار کمینه جابهجایی جانبی، کاهش یافته و همچنین به سمت زوایای کوچکتر میل می کند.



شکل ۵: جابهجایی جانبی باریکه بازتاب، بر حسب تغییرات پتانسیل شیمیایی در محدوده مشخصی از زوایای موج فرودی.

### نتيجه گيرى

در این مقاله با در نظر گرفتن یک ساختار شبه بلور فوتونی اوکتوناچی در حضور لایههای گرافن، ویژگیهای اپتیکی سامانه مورد مطالعه قرار گرفت. ملاحظه کردیم که با به کارگیری روش ماتریس انتقال طیفهای بازتاب و جذب برای پتانسیلهای شیمیایی در محدوده بسامدی تراهرتز بدست آمد. تأثیر ضخامت لایهها با شاخص شکستهای مختلف روی باریکه بازتاب در دو حالت روبهجلو و روبهعقب مطالعه گردید و همچنین تأثیر پتانسیلهای شیمیایی مربوط به لایه گرافن روی طیف جذب به ازای تغییرات بسامد و تغییرات زاویه موج الکترومغناطیسی فرودی بدست آمده و مقدار بهینه پتانسیل شیمیایی گزارش شد. نهایتاً، رفتار مقدار کمینه جابهجایی جانبی مربوط به باریکه بازتاب، در محدوده زاویهای مشخص به ازای پتانسیلهای شیمیایی مختلف مورد مطالعه قرار

مرجعها

- P. Markos and C. M. Soukolis, Wave propagation from electrons to photonic crystals and left-handed materials, Princeton and Oxford: Princeton Uni. Press, 2008.
- [2] w. Cai and V. Shalaev, Optical Metamaterials: Fundamentals and Applications, (Springer, New York, 2010).
- [3] G. Goos and H. Hänchen, "Ein neuer und fundamentaler versuch zur total reflektion," Ann. Phys., vol. 1, pp. 333-346, 1947.
- [4] E. F. Silva, C. H. Costa, M. S. Vasconcelos and D. H. A. L. Anselmo, "Transmission spectra in graphene-based octonacci one-dimensional photonic quasicrystals," *Opt. Mat.*, vol. 6, 2018.
- [5] A. Mohammadpour, J. Barvestani and A. S. Vala, "Extraordinary directional optical properties of a parity-time symmetric onedimensional photonic lattice," *Opt. Commun.*, vol. 500, no. 127342, 2021.
- [6] G. W. Hanson, "Dyadic Green's function and guided surface waves on graphene," J. Appl. Phys., vol. 103, no. 064302, 2006.
- [7] L. A. Falkovsky and S. S. Pershoguba, "Optical far-infrared properties of a graphene monolayer and multilayer," *Phys. Rev. B*, vol. **76**, no. 153410, 2007.
- [8] T. Zhan, X. Shi, Y. Dai, X. Liu and J. Zi, "Transfer matrix method for optics in graphene layers," *J. Phys.: Condens. Matter*, vol. 25, no. 215301, 2013.
- [9] A. Mohammadpour, J. Barvestani and A. S. Vala, "Comprehensive study of singular points in a PT-symmetric Thue-Morse multilayer," *Phys. Scr.*, vol. 97, no. 125501, 2022.





# سنتز سبز نانوساختار اکسید مس به کمک عصاره میخک و بررسی اثر کلسینه کردن بر خواص ساختاری و ایتیکی آن

فخرالدين، مهرنوش ؛ شريعتمدار طهراني، فاطمه \* ؛ علياننژادي، مريم ا

ادانشکده فیزیک، دانشگاه سمنان، سمنان، ایران

چکیدہ

در این مقاله، سنتز نانوذرات اکسید مس با استفاده از عصاره میخک با روش سل-ژل سبز به عنوان یک روش کمهزینه و زیستسازگار با موفقیت گزارش می شود. همچنین، تاثیر فرایند کلسینه کردن در دمای ۵۰۰درجه نیز بر نانوساختارهای سنتز شده بررسی می شود. نتایج نشان می دهد که کلسینه کردن باعث تغییر فاز نمونه های اکسید مس و بهبود کیفیت بلوری نمونه شده و رشد بلورک و افزایش اندازه بلورک در طی این فرایند اتفاق می افتد. همچنین، مورفولوژی ساختار (نانوذرات آگلومره و نانورشته ها) در طی فرایند کلسینه کردن تغییر (جمجمهای شکل و دسته های نانوسیم بلند) می کند. علاوه براین، نتایج موید تاثیر قابل توجه کلسینه کردن بر ویژگی-های اپتیکی نانوساختارهای سنتز شده است و کاهش شکاف انرژی نواری با فرایند کلسینه کردن را نشان می دهد. واژه های کلیدی: اکسید مس، سنتز سیز، روش سل-ژل، میخک، خواص ساختاری

### Green synthesis of copper oxide nanostructure using cloves extract and studying the effect of calcination on its structural and optical properties

**Fakhredin, Mehrnoosh<sup>1</sup>; Shariatmadar Tehrani, Fatemeh<sup>1\*</sup>, Aliannezhadi Maryam<sup>1</sup>** <sup>1</sup>Faculty of Physics, Semnan University, PO Box: 35195-363, Semnan, Iran

#### Abstract

In this article, successful synthesis of copper oxide nanoparticles using clove extract by green sol-gel method as a low-cost and biocompatible method is reported. Also, the effect of the calcination process at 500 °C on the synthesized nanostructure is investigated. The results show that calcination changes the crystalline phase of the nanoparticles and improves its crystalline quality, and increases the crystallite size. Also, the morphology of the structure (agglomerate nanoparticles and nanowires) changes (skull-shaped and long nanowire bundles) after calcination process. In addition, the results confirm the significant effect of calcination on the optical properties of the synthesized nanostructures and the reduction of the energy band gap with the calcination process. **Keywords**:copper oxide, green synthesis, sol-gel method, cloves, structural properties

PACS No. 81

گستردهای از کاربردها از جمله کاربرد در حسگرهای گازی، حسگرهای زیستی، آشکارسازهای عکس، رسانههای ذخیرهسازی مغناطیسی، ابرخازنها، فوتوکاتالیز، حذف آلایندههای معدنی و کاربردهای ضد میکروبی مورد نیاز است [٤]. سنتز سبز نسبت به سنتزهای شیمیایی سنتی مزایایی چون هزینه کمتر، کاهش آلودگی و زیستسازگاری دارد و بنابراین برای سنتز نانوذرات اکسید فلزی از جمله اکسید مس بسیار مناسب است [٥]. برای سنتز نانوذرات دیاکسید مس عصاره میوهها و گیاهان مختلف از جمله آب انگور [7]، آبلیمو [۷]، پودر قهوه [۸] آلوئهورا [۹] و ... استفاده شده و

#### مقدمه

امروزه نانوذرات مبتنی بر نانوساختارهای اکسیدهای فلزات واسطه (TMO) از جمله اکسید مس به دلیل کاربرد گسترده در پزشکی، صنعت و حسگری مورد توجه خاص محققان قرار داردند [۱]. دو اکسید پایدار و شناخته شده مس وجود دارد که اولی اکسید مس (CuO) با نام معدنی تنوریت است که جامدی سیاه رنگ است و دومی Cu<sub>2</sub>O با نام معدنی تنوریت است که جامدی سیاه رزگ است و نوع q با گاف نواری در گستره eV ۸/۰ - ۲/۲ می باشد [۲, ۳]. درک خواص فیزیکی و شیمیایی اکسید مس به دلیل طیف

نانوساختارهای مختلف کروی، نانومیله، برگی شکل و.... تولید شدهاندکه دارای خواص متمایزی چون خاصیت ضد باکتریایی قوی، فوتوکاتالیستی، تصفیه آب، دارویی و ... میباشند. با توجه به مزایای سنتز سبز و اهمیت تولید نانوساختارهای اکسید مس در این مقاله، سنتز این نانوساختارها با استفاده از عصاره گل میخک و مبتنی بر روش سل-ژل مطالعه میشود که در آن، با ادغام سلها و یک حلال باعث تشکیل شکل کنترلشده در محلول اتانول-آب در دمای پایین برای تشکیل نانومواد اکسید مس با اندازه کوچکتر و مساحت سطح ویژه بزرگتر می شود.

### روش آزمایش

برای تهیه عصاره میخک، در ابتدا گیاه خشکشده سه بار با آب مقطر و دوبار با آب دیونیزه (DI) شستشو داده شده و در آون دمای ۷۰ درجه سلسیوس دور از نور، خشک و سپس آسیاب شد. ۱۰گرم پودر میخک با ۵۰ میلیلیتر آب ID به مدت ۱۰ دقیقه جوشانده و در آون ۷۰ درجه به مدت اساعت قرارداده شد. سپس ۵۰ میلیلیتر آب افزوده و ۱۵ دقیقه تحت امواج پروب فراصوت با توان ۱۰۰وات قرارداده شده و از صافی و سانتریفیوژ برای جداسازی عصاره میخک استفاده شد.

۱۰ میلی لیتر از عصاره به دست آمده با ٤۰ میلی لیتر آب ID رقیق شد و با ۳۰ میلی لیتر محلول ۳/۰ مولار نیترات مس سه آبه مخلوط و مادقیقه روی همزن مغناطیسی قرار داده شد. سپس، pH با قطره قطره اضافه کردن محلول ۲ مولار سدیم هیدرو کسید، به ۱۱ رسانده شد. در مرحله بعد، محلول به مدت دو ساعت در دمای C رسانده شد. در مرحله بعد، محلول به مدت دو ساعت در دمای C رنگ پیدا کند. محلول به دست آمده سه بار با آب و دوبار با اتانول شستشو داده شد و در آون ۷۰ درجه به مدت ۲۱ الی ۱۶ ساعت خشک شد. محصول به دست آمده جمع آوری و قسمتی از آن در دمای  $\mathbf{C}^{\circ}$  ۰۰۰ به مدت ۲ ساعت کلسینه شد. سپس، نمونه ها

### نتايج و بحث

الگوی XRD نمونههای سنتز شده در شکل ۱ نشان داده شده است. تحلیل این دادهها با نرم افزار Xpert موید تشکیل فازهای

بلوری CuO و Cu<sub>2</sub>O میباشد. در الگوی مربوط به نمونه خام، چند قله پراش با شدت کم مشاهده میشود که با توجه به انطباق با کارت استاندارد ۵۷۷۰–۹۰۰–۹۲ مربوط به فاز مکعبیCu<sub>2</sub>O با گروه فضایی Pn-3 با ثابتهای شبکه Å ec=2.20 = ه است. با این حال، الگوی XRD نمونه کلسینه شده دارای قلههای تیز و شدید است که نشاندهنده بهبود کیفیت بلوری آن می باشد. فاز بلوری نمونه کلسینه شده با توجه به انطباق با کارت استاندارد ۹۲–۹۰۱ مرکم، ساختار مونوکلینیک CuO با گروه فضایی ClCl و ثابتهای شبکه 1023, cu<sub>2</sub> داری منجر به یک گذار فاز در نمونه نشان می دهد فرایند کلسیناسیون منجر به یک گذار فاز در نمونه شده است. گزارش های موجود تایید می کند که فاز مونوکلینیک CuO نسبت به فاز مکعبیCu<sub>2</sub> در دماهای بالا پایدارتر است[۱۰].



شکل ۱- نتایج XRD نمونه های خام و کلسینه شده اکسید مس. اندازه بلورک با روش شرر محاسبه شده و مقدار آن برای نمونه خام و کلسینه شده به ترتیب برابر ۲۲۲Å و ۲۸۵Å بدست آمد. بنابراین، رشد بلورکها با کلسینه کردن نمونه رخ داده است. طیف FTIR حاصل از نمونه های سنتزشده در شکل ۲ نشان داده

یده است که حاکی از تشکیل مولکول اکسیدمس در هردو نمونه است. پیوندهای شیمیایی مربوط به هر یک از قلههای جذب در داخل طیف FTIR نمونهها مشخص شده است [۱۱].







شکل ۲-طیف FTIR نمونه اکسید مس خام و کلسینه شده. همچنین، تصاویر FESEM نمونه های اکسید مس خام و کلسینه-شده به ترتیب در شکل های ۳ و ٤ ارائه شده است. همانطور که در شکل ۳ دیده می شود، تشکیل نانوساختار در دو مورفولوژی نانوذرات آگلومره و نانور شته ها در ساختار خام تایید می شود. تصویر نمونه کلسینه شده در شکل ٤ موید افزایش ابعاد این ذرات و رشته ها می باشد. توزیع اندازه ذرات و قطر رشته های نانوساختارهای اکسید مس خام و کلسینه، تابع log-normal برازش شده و مقدار میانگین ابعاد نانوساختارها با نرمافزار Digimizer.





شكل ٤- (الف) تصوير FESEM نمونه كلسينه شده (ب) توزيع اندازه نانو رشتهها و (ج) توزيع نانوذرات

میزان درصد ترکیب شیمیایی عناصر و خلوص نمونه نیز به کمک آنالیز EDX بررسی شد و نتایج نشان داد که درصد اتمی نمونه خام و کلسینه به ترتیب شامل ۱۷٪ و ٤١٪ مس و ٤٩٪ و ٥٨٪ اکسیژن میباشند. همچنین در نمونه خام درصد اتمی کربن ٣٣٪ شناسایی شد که به ترکیبات فنولی موجود در عصاره مربوط می شود. درصد بالای اکسیژن در این نمونه نیزمی تواند مربوط به این ترکیبات فنولی باشد.

شکل ۵-الف، طیف بازتاب پخشی نمونههای اکسید مس خام و کلسینه شده را نشان می دهد. نتایج نشان داد جذب نمونه ها در ناحیه فرابنفش، مرئی و بخشی از ناحیه فروسرخ (تا حدود ۹۰۰ نانومتر) ناچیز می باشد. همچنین، کلسینه کردن نمونه اکسید مس بر طیف انعکاس بسیار تاثیر گذار است. با استفاده از تابع کوبلکا-مونک (رابطه ۱) که با ضریب جذب متناسب است و به کمک روش تاک (رابطه ۲) می توان شکاف انرژی نواری را برای هر دو نمونه محاسبه کرد. دراین روابط R مقدار بازتاب پخشی،  $\alpha$  ضریب جذب،  $E_i$  انرژی فوتون،  $E_g$  شکاف انرژی نواری و B ضریبی ثابت است.

<sup>1</sup> Kubelka munk

<sup>2</sup> Tauc

(الف)



- [1] Alaa El Din Mahmud et al., "Green Copper Oxide nanoparticles for lead, nickle, and cadmium removal from contaminated water," *nature*, vol. 11, 2021
- [2] Y. Wang et. al., "Electronic structures of Cu2O,Cu4O3, and CuO: A joint experimental and theoretical study," *Phys. Rev. B*, vol. 94, no. 15, p. 245418, 2016,
- [3] Mr. Wasil, et.al., "Determination of energy gap copper oxide by four probe methods," *International Journal of Renewable Energy Technology Research* vol. 3, no. 10, pp. 1-8, 2014.
- [4] Surendra. K. Shinde. et.al., "Influence of Mn incorporation on the supercapacitive properties of hybrid CuO/Cu(OH)2 electrodes," *rsc advanced*, vol. 5, 2015
- [5] Abdul Waris, et. al., "A comprehensive review of green synthesis of copper oxide nanoparticles and their diverse biomedical applications," *Inorganic Chemistry Communications*, vol. 123, 2021
- [6] Periyannan Kaleeswarran, et. al., "Coherent design of indium doped copper bismuthate-encapsulated graphene nanocomposite for sensitive electrochemical detection of Rutin," *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, vol. 643, 2022
- [7] R.Vandamar Poonguzhali, et. al., "Natural citric acid assisted synthesis of CuO nanoparticles: Evaluation of structural, optical, morphological properties and colloidal stability for gas sensor applications," *Ceramics International*, vol. 48, no. 18, pp. 26287-26293, 2022
- [8] A. R. Saeid Taghavi Fardood, "Green Synthesis and Characterization of Copper Oxide Nanoparticles Using Coffee Powder Extract," J. Nanostruct., vol. 6, no. 2, pp. 167-171, 2016
- [9] S. S. K. Kumar, "Aloe-vera leaf extract as a green agent for the synthesis of CuO nanoparticles inactivating bacterial pathogens and dye," *Journal* of Dispersion Science and Technology, vol. 42, no. 13, 2020,
- [10] B. Balamurugan et. al, "Modifying the nanocrystalline characteristics—structure, size, and surface states of copper oxide thin films by high-energy heavy-ion irradiation," *JOURNAL OF APPLIED PHYSICS*, vol. 92, p. 3304, 2002, doi: 10.1063/1.1499752.
- S. K. Shinde, D. P. Dubal, G. S. Ghodake, P. Gomez-Romero, S. Kim, and V. J. Fulari, "Influence of Mn incorporation on the supercapacitive properties of hybrid CuO/Cu (OH) 2 electrodes," *RSC Advances*, vol. 5, no. 39, pp. 30478-30484, 2015.

$$F(R) = (1-R)^2/2R \qquad (1)$$

$$(\alpha E)^2 = B(E-E_g) \qquad (2)$$
(الف)



شکل۵- (الف) طیف بازتاب پخشی و ب) محاسبه شکاف انرژی نواری نمونه-های اکسید مس

با رسم نمودار <sup>۲</sup>(αE) بر حسب انرژی و برونیابی قسمت خطی آن می توان مقدار شکاف انرژی مستقیم را بدست آورد که در شکل ٥-ب نشان داده شده است. نتایج حاکی از تاثیر قابل توجه فرایند کلسینه کردن بر شکاف انرژی نواری است. این اثر می تواند به تغییر در ساختار بلوری ، تغییر کیفیت بلوری، تغییر در میزان ناخالصیها و پیوندهای موجود در نمونه مربوط باشد.

### نتيجه گيرى

در این مقاله سنتز نانوساختارهای اکسید مس با روش سبز به کمک عصاره میخک انجام و تاثیر فرایند کلسینه کردن بر روی مشخصه-های ساختاری و اپتیکی نانوساختارها مورد بررسی قرار گرفته است. نانو ذرات کروی آگلومره و نانو میله ها در نمونه خام اکسید مس و نانوذرات جمجمه ای شکل (بی شکل) و نانو رشته های کمربندی در نمونه های کلسینه شده در دمای ۲۰۰<sup>0</sup> مشاهده شد کمربندی در نمونه های کلسینه شده در دمای ۲۰۰<sup>0</sup> مشاهده شد است. نتایج بررسی ویژگی های بلوری نیز موید ایجاد ساختارهای است. نتایج بررسی ویژگی های بلوری نیز موید ایجاد ساختارهای باعث تغییر فاز بلوری، بهبود مشخصه های بلوری و رشد اندازه بلورک نمونه اکسید مس می شود. بررسی ویژگی های نوری نمونه نشان می دهد که نمونه در ناحیه وسیعی از فرابنفش تا فروسرخ نزدیک دارای انعکاس اندک است وبه دلیل گذار فاز بلوری، مکاف انرژی نواری با فرایند کلسینه کردن به طور قابل توجهی کاهش می یابد.





فاز کریستال پیوندی در مدل اسپینی ککوله-هایزنبرگ

میرمجربیان، فاطمه ؛ جهرمی، سعید؛ ابویی، جهانفر دانشکده فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، ازبان

چکیدہ

در این مقاله به بررسی دیاگرام فاز مدل اسپینی ککوله-هایزنبرگ بر روی شبکه لانه زنبوری با استفاده از روش عددی حالتهای زوج درهمتنیده تصویر شده بینهایت (iPEPS) می پردازیم. نشان می دهیم دیاگرام فاز این مدل شامل فازهای منظم مغناطیسی فرومغناطیس و نیل در حد برهمکنش قوی هایزنبرگ است . هم چنین در حدی که جمله ککوله بسیار بزرگتر از جمله ی هایزنبرگ است فاز مایع اسپینی کوانتومی کیتائف دیده می شود. در نواحی میانی بین فازهای مغناطیسی منظم و فازهای مایع اسپینی کوانتومی فاز کریستال پیوندی قرار دارد که هیچ یک از تقارن های هایمیلتونی را نمی شکند و الگوی یکتا از همبستگی بین جایگاههای شبکه را نشان می دهد . وجود این فاز کاملاً متفاوت از نتایجی است که در مدلهای دیگر شکانف هاین می شود.

### Valence-bond crystal phase in the Kekule-Heisenberg spin model

#### Mirmojarabian, Fatemeh; Jahromi, Saeed; Abouie, Jahanfar

Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences (IASBS), Zanjan, Iran

#### Abstract

In this paper, we investigate the ground state phase diagram of the Kekule-Heisenberg spin model on honeycomb lattice using infinite projected entangled pair states (iPEPS) method. We demonstrate that in the limit of strong Heisenberg interaction the ordered magnetic phases; ferromagnetic and Neel phases, appear in the phase diagram. We also show that in the limit of large Kekule interaction, the ground state possesses the Kitaev quantum spin liquid phase. In the intermediate regions between the ordered magnetic phases and quantum spin liquid phase, there is a valence bond crystal (VBC) phase that preserve all symmetries of the Hamiltonian and shows the unique pattern of short-range correlation between lattice sites. The existence of this phase is generically different from the results previously seen in the Kitaev-Heisenberg model.

PACS No. 64.60, 71.10, 75.10

نوع اول الگوی پیوند ظرفیت تشکیل شده در سیستم یکتا است و همهی تقارنهای شبکه حفظ می شود به طوری که کلاستر منطبق بر یاختهی یکه شبکه است، و در نوع دوم بعضی از تقارنهای گسسته شبکه به طور خود به خود می شکند. اخیراً تلاش های زیادی توسط محققین در جهت یافتن و معرفی شبکه های اسپینی دارای فازهای کریستال پیوندی و مایع اسپینی صورت گرفته است[7].

مقدمه

یکی از زمینههای تحقیقاتی مورد توجه در فیزیک ماده چگال جستجو برای یافتن موادی است که در دماهای پایین تر از انرژی برهمکنشی سیستم، هیچ نظم بلند برد مغناطیسی ندارند و افت و خیزهای کوانتومی منجر به ایجاد فازهای پارامغناطیس کوانتومی میشوند. از جمله این فازها می توان به فازهای مایع اسپینی و کریستال پیوندی اشاره کرد که در اولی تقارن های شبکه نمی شکنند، اما در دومی طبق تعریف ارایه شده در[۱] بر اساس شکست یا عدم شکست تقارن به دو نوع دسته بندی می شوند: در





شکل ۱ : مدل ککوله-هایزنبرگ لانه زنبوری. نقطه ها اسپینهای 1/2 هستند و رنگهای قرمز، سبز و آبی به ترتیب نشان دهنده برهمکنشهای تبادلی رنگهای م<sup>z</sup> σ<sup>z</sup>, σ<sup>y</sup> σ<sup>y</sup>, σ<sup>x</sup> σ<sup>x</sup>

نشان داده شده است که در سیستمهای اسپینی با افت و خیزهای کوانتومی قوی امکان شکل گیری حالتهای مایعات اسپینی کوانتومی بیشتر است. بنابراین مشاهدهی این حالتها در سیستمهای اسپینی که اسپین کوچکتر و درماندگی اسپینی دارند محتمل تر است [۵ و ۴ و ۳].

اما معرفی مدل هایی که همزمان هر دو فاز مایع اسپینی کوانتومی و کریستال پیوندی را در دیاگرام فاز حالت پایه خود داشته باشند حائز اهمیت است. در این مقاله مدل ککوله-هایزنبرگ لانه زنبوری را معرفی می کنیم و نشان می دهیم در دیاگرام فاز حالت پایه این سیستم علاوه بر فازهای منظم مغناطیسی نیل و فرومغناطیس، فازهای کریستال پیوندی نوع یک و مایع اسپینی کوانتومی وجود دارند که نظم مغناطیسی بلند برد ندارند. با تعریف پارامتر نظم های مختلف و بررسی توابع همبستگی کوتاه برد نشان می دهیم در گذار از فازهای مغناطیسی به فاز بی نظم مایع اسپینی، یک فاز میانی کریستال پیوندی پدیدار می شود که نظم دایمر پلاکتی دارد.

### معرفي مدل

یک شبکه لانه زنبوری دو بعدی در نظر بگیرید که روی نقاط آن اسپینهای 1/2 نشسته اند. برهم کنش بین اسپینهای شبکه با مدل ککوله-هایزنبرگ داده می شود:

$$\begin{split} H &= K \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha} \sigma_i^{\alpha} \sigma_j^{\alpha} \ + \ J_H \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j \ , \\ \text{ So all iteration of a state of$$

قبل از اینکه فازهای حالت پایه سیستم را به ازای مقادیر مخلتف برهم کنشها بدست آوریم در دو حالت حدی هایزنبرگ–غالب و ککوله–غالب خصوصیت حالت پایه را بررسی می کنیم. الف) حد هایزنبرگ–غالب (J<sub>H</sub> ≠ 0, K = 0) در این حالت انتظار داریم در حالت پایه سیستم نظمهای بلند برد مغناطیسی نیل و فرومغناطیس به ترتیب برای 0 < J<sub>H</sub> و > J<sub>H</sub> مغناطیسی نیل و فرومغناطیس به ترتیب برای 0 داز نیل همبستگی کوتاه برد اسپینها برای همه پیوندها منفی و برابر است اما در فاز فرومغناطیس همه همبستگیها مثبت هستند. برانگیختگی ها در این فازها مگنونها هستند که رابطه پاشندگی مشخصی دارند.

 $(J_H=0,K
eq 0)$ ب) حد ککوله–غالب ( $J_H=0,K
eq 0$ 

در این حد مغناطش موضعی بر روی تمام جایگاه های شبکه صفر است و حالت پایه سیستم هیچ نظم مغناطیسی بلند بردی ندارد. حالت پایه در این حد یک پارامغناطیس کوانتومی است. رفتار همبستگی های کوتاه برد اسپینی نشان می دهد که در این حالت هیچ نوع تقارنی شکسته نشده است. در این حالت روی هر یک از پیوندها همبستگی متناظر با نوع آن پیوند غیر صفر و همبستگی دو نوع دیگر صفر است، به عنوان مثال بر روی پیوندهای سبز که برهمکنش  $\sigma^y_i \sigma^y_j$  غیر صفر و بقیه برهمکنش ها صفر هستند همبستگیهای  $\left(\sigma_{i}^{y}\sigma_{j}^{y}
ight)$  غیرصفر و آنهای دیگر صفر هستند. این دو ویژگی از نشانههای مایع اسپینی کوانتومی از نوع کیتائف هستند K>0 بنابراین در این حد، هم به ازای K<0 و هم به ازای حالت پایه یک مایع اسپینی کوانتومی است که با نتیجهی حل دقیق مدل ككوله فرومغناطيس و پادفرومغناطيس مطابقت دارد [۵]. برانگیختگیهای فاز مایع اسپینی کوانتومی کیتائف، کسری و از نوع آنيونهاي آبلي هستند. ويژگيهاي توپولوژيک اين فاز موجب می شود در برابر اختلالات موضعی مقاوم باشد و از این جهت

مطالعهی این فاز در محاسبات کوانتومی مورد توجه است[۵]. در حضور همزمان برهمکنشهای هایزنبرگ و ککوله دیگر هامیلتونی حل پذیر دقیق نیست و برای بررسی خصوصیات حالت پایه این مدل باید از روشهای عددی مانند روش حالتهای جفت درهمتنیده تصویر شده بینهایت (iPEPS) استفاده کرد.





شکل۲ : انرژی بر جایگاه حالت پایه سیستم و مشتق دوم آن بر حسب پارامتر θ. پارامتر θ به صورت J<sub>H</sub> = sinθ و K = cos θ تعریف می شود.

#### روش حالتهای جفت درهمتنیده تصویرشده بینهایت

اگر یک مدل کوانتومی دو بعدی با N جایگاه شبکه در نظر بگیریم، اندازهی فضای هیلبرت سیستم به طور نمایی با اندازهی سیستم N رشد میکند. بنابراین مسئلهی پیدا کردن ویژه حالتهای سیستم حتی برای سیستمهای نه چندان بزرگ اساساً دشوار است. برای هامیلتونی های با برهمکنشهای موضعی و دارای گاف انرژی میتوان با استفاده از روش iPEPS نمایش بهینه ای از حالت پایه سیستم را بر حسب شبکه های تانسوری بدست آورد و مورد مطالعه قرار داد.

یه طور کلی یک حالت PEPS را می توان به صورت زیر نوشت:  

$$|\Psi\rangle = \sum_{N=0}^{d} F\left(A_{s_{r_{1}}}^{[r_{1}]}, ..., A_{s_{r_{N}}}^{[r_{N}]}\right) |s_{r_{1}}, ..., s_{r_{N}}\rangle,$$

می شود. به منظور محاسبهی حالت پایه میتوان یک حالت تصادفی اولیه (*ψ*0 را در زمان زمان موهومی *β* تحت اثر هامیلتونی مسئله به صورت زیر تحول داد:

$$\begin{split} \lim_{\beta \to \infty} \frac{e^{-\beta H}|\Psi_0\rangle}{\|e^{-\beta H}\|_{\infty}} &= \lim_{\beta \to \infty} \frac{e^{-\beta H}|\Psi_0\rangle}{\|e^{-\beta H}\|_{\infty}} \\ \lim_{\beta \to \infty} \frac{e^{-\beta H}|\Psi_0\rangle}{\|e^{-\beta H}\|_{\infty}} &= 0 \\ \text{ for a constraint of a state of a state$$

### نتايج

در شکلهای ۲، ۳ و ۴ به ترتیب نتایج حاصل از روش iPEPS را برای انرژی حالت پایه، پارامتر نظم سیستم و دیاگرام فاز حالت پایه نمایش داده ایم. شکستگیها و تغییر شیبهای موجود در انرژی حالت پایه سیستم نشان دهنده رخ دادن گذار فازهایی در حالت پایه سیستم است. همچنین می توان از تغییر رفتار انرژی حالت پایه به نوع گذار فاز موجود پی برد.

گذار فازهای مختلف را می توان با استفاده از پارامتر نظم سیستم و همبستگی های کوتاه برد به درستی مشاهده کرد. در شکل 3 مغناطش کل هر جایگاه  $\langle \sigma_i \rangle \rangle = M$  و همبستگی کوتاه برد بین دو جایگاه  $\langle \sigma_i.\sigma_j \rangle = S$  را رسم کرده ایم (شکل ۳). همانطور که دیده می شود مغناطش کل برای فازهای مایع اسپینی کوانتومی و کریستال پیوندی صفر است با این وجود رفتار همبستگی کوتاهبرد این دو ناحیه با یکدیگر متفاوت است. همچنین علاوه بر حالتهای حدی مایع اسپینی کوانتومی و فاز نیل و فرومغناطیس نواحی میانی بین دو حالت حدی با روشن کردن جمله هایزنبرگ با علامت مثبت در کنار جملهی ککوله و بزرگتر شدن مقدار آن نسبت به جفتشدگی ککوله نظم مغناطیسی نیل در دیاگرام فاز نادازه ماهر می شود. با افزایش مجدد پارامتر  $\theta$  و بزرگتر شدن اندازه تسبتی میشود. با افزایش مجده پارامتر و رود دازی می می جملهی ککوله فرومغناطیس با توجه به اینکه سیستم درماندگی



Ferro

4

5

VBC





-0.4

-0.5

2

θ (rad) شكل٣ : بالا- مغناطش كل. پايين- همبستگي كوتاه برد بر حسب پارامتر θ. که در آن با حفظ تقارنهای هامیلتونی مغناطش صفر است. این فاز میانی که مابین نظم نیل و مایع اسپینی کوانتومی واقع شده است. دارای مشابهتهایی با هر یک از این دو فاز است، به عنوان نمونه نظم بلند بردی از پلاکتها در این فاز دیده می شود و مغناطش کل در این فاز صفر است. نکته قابل توجه این فاز که آن را فاز كريستال پيوندى VBC مىناميم، تفاوت با فاز مايع اسپينى کوانتومی است، حالت پایه ی این فاز یکتاست و همبستگی های کوتاه برد الگوی یکتایی از دایمرهای پلاکت را نشان میدهد و رفتار آن مشابهتی با همبستگی کوتاه برد مایع اسپینی کیتائف که در حالت حدى دو توصيف شد ندارد. اين فاز در شكل ۴ با رنگ آبي نشان داده شده است. در ناحیه با heta بزرگتر از  $\pi$  و افزایش اندازه جمله هایزنبرگ فرومغناطیس شاهد ایجاد نظم مغناطیسی در دیاگرام فاز هستیم که در ادامه آن با افزایش پیدا کردن اندازه جمله ککوله این نظم تضعیف شده و مانند آنچه در بالا گفته شد فاز VBC در سیستم ظاهر میشود. دیاگرام فاز مدل ککوله-هایزنبرگ کاملاً متفاوت از دیاگرام فاز مدل کیتائف-هایزنبر گ است که در آن انواع مختلفی از نظم های مغناطیسی زیگزاگ و مارپیچ دیده می شود. در دیاگرام فاز مدل ککوله-هایزنبرگ شاهد ظهور فاز



سکل ۱: دیادرام قار مدل کخونه حمایزبری، همبستگی دوناه برد در قایع اسپیلی کوانتومی کاملاً همانند توزیع برهمکنش ها در شبکه است. همبستگی های کوتاه برد در بلور پیوندی الگویی بلند برد از دوتایی های منظم دارد. VBC هستیم و مشاهده این فاز از ویژگیهای مدل چندنواره ککوله-هایز نبرگ است.

### سپاسگزاری

از حمایت معاونت پژوهشی دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان صمیمانه تشکر میکنیم.

مرجعها

- [1] Claudine Lacroix, Philippe Mendels, Frédéric Mila, Introduction to Frustrated Magnetism, chapter2
- [2] M. R. Norman, Herbertsmithite and the Search for the Quantum Spin Liquid, *Rev. Mod. Phys.* 88, 041002 (2016)
- [3] L. Balents; "Quantum mechanics in a spin" Nature 464, 199 (2010).
- [4] A. Kitaev; "Anyons in an exactly solved model and beyond" Annals of Physics 321, 2 (2006)
- [5] F Mirmojarabian, M Kargarian, A Langari, Phase diagram and thermal Hall conductivity of the spin-liquid Kekulé-Kitaev model, *Physical Review B* 101 (11), 115116, (2020).
- [6] J. Jordan, R. Or'us, G. Vidal, F. Verstraete, J. I. Cirac, Physical Review Letters 101, 250602 (2008).





# میکروابرخازنهای چاپ شده تمام حالت جامدی بر پایه اکسید/هیدروکسید کبالت

نيكان افصحي، نعيمه ناصري

ادانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شریف، تهران

چکيده

در راستای تحقق انقلاب صنعتی چهارم و دستیابی به فناوری های پیشگامانه ای نظیر ایترنت اشیا، سنسورهای انعطافپذیر و پوشیدنی و به طور کلی فناوریهای الکترونیکی میکرومقیاس، طراحی و ساخت افزاره های ذخیره انرژی میکرومقیاس از اهمیت بسزایی برحوردار است. در بین این افزاره ها میکروابرخازنها توجه بسیاری را به خود جلب نموده اند. [1] در این پروژه، افزاره های میکروابرخازنی با استفاده از روش جوهرافشانی و بر پایه نانوساختارهای اکسید و هیدروکسید بسیاری را به خود جلب نموده اند. [1] در این پروژه، افزاره های میکروابرخازنی با استفاده از روش جوهرافشانی و بر پایه نانوساختارهای اکسید و هیدروکسید بسیاری را به خود جلب نموده اند. [1] در این پروژه، افزاره های میکروابرخازنی با استفاده از روش جوهرافشانی و بر پایه نانوساختارهای اکسید و هیدروکسید کبلت ساخته شده اند. نانومکعبهای اکسید کبلت به همراه نانوصفحات هیدروکسید کبلت با استفاده از روش هیدروترمال به دست آمده و با تهیه جوهرهای آبی قابل کبلت ساخته شده اند. نانومکعبهای اکسید کبلت به همراه نانوصفحات هیدروکسید کبلت با استفاده از روش هیدروترمال به دست آمده و با تهیه جوهرهای آبی قابل چاپ ریایه این نانوساختارها، افزاره های میکروابرخازنی با میتروکسید کبلت با ستفاده از روش هیدروترمال به دست آمده و با تهیه جوهرهای آبی قابل جاپ بر پایه این نانوساختارها، افزاره های میکروابرخازنی به صورت ساختارهای بین انگشتی ساخته شده اند. این افزارهای میکرومقیاس می توانند ظرفیتی معادل با چاپ بر پایه این نانوساختارها، افزاره های میکروابرخازنی به صورت ساختارهای بین انگشتی ساخته شده اند. این افزاره های میکرومقیاس می از ۲۰۰۰ هد. در چگالی انرژی و چگالی توان به ترتیب معادل با ۲۰۰ سیاد ترمان و حمقای مان و تاشدگی میزان و میلی با از ۲۰۰۰ می در در سیاری و تانند ظرفیت و به برد و در تشان داده و به چگالی انرژی و چگالی توان به ترتیب معادل با ۲۰ سیند و را و ۲۰ سیادی و در با سیاری و در سیاری و درد با و درد. این و درد و با با درد و با درد و به چگالی انرژی و چگالی توان به ترتیب معادل با ۲۰۰ سیاری و در با و د در چان برد و تاند. در چگالی جریان تام می مان و مان و با و می به بازی و مین و بازی به ترتیب معادل با ۲۰۰ باز در می مید و با با درد و با با درد و با با درد و تاشدگی مولی و با و درم بیش و با با و درد و با بازی و به برای و درد و با بان و

واژه های کلیدی: میکروابرخازن، اکسید کبالت، هیدروکسید کبالت، چاپ جوهرافشانی

#### Inkjet-Printed Cobalt Oxid/ Hydroxide as All-Solid-State Microsupercapacitors

#### Afsahi, Nikan; Naseri, Naimeh

Department of Physics, Sharif University of Technology, Tehran

#### Abstract

Following the 4<sup>th</sup> industrial revolution and high emerging demand for internet of things (IoT), flexible and wearable electronics, micro-scale energy storage devices, specially microsupercapacitors have attracted much attention. In this work, inkjet-printed microsupercapacitor devices were built using cobalt-oxide nanocube/ cobalt hydroxide nanoflake in the form of stable and printable inks. These highly capacitive nanostructures were synthesized using a simple one-pot hydrothermal method. Printable water-based inks were developed and successfully printed on flexible paper. These printed devices show specific areal capacitances as high as 35mF.cm<sup>-2</sup>. Also, the devices show high energy and power densities of 5.71µWh.cm<sup>-2</sup> and 0.07mW.cm<sup>-2</sup>, respectively. Additionally, the flexible devices show good capacitance retention of over 95% after almost 1000 bends and folds which confirms the good capability of mechanical stress tolerance.

*Keywords*: *Microsupercapacitors*, *Cobalt-oxide*, *Cobalt-hydroxide*, *Inkjet-printing technology PACS No.* 82.82.47.Jk

مقدمه مقدمه وی این روش می توان به صرفه بودن، سادگی، چاپ جوهرافشانی یکی از روشهای بسیار مناسب ساخت افزاره های ابرخازنی در مقیاس میکرو می باشد. از چاپ بر روی انواع بسترهای انعطافیذیر نظیر کاغذ، طلق و ڎٳؿڲٳڋ بيونييي

> پلاستیک باعث توجه به این روش مدرن ساخت افزاره شده است. در این بین گزارشات متنوعی از کاربرد این روش برای ساخت ادوات میکروابرخازنی در دسترس می باشد. به عنوان مثال ژنگ و همکاران موفق به ساخت میروابرخازنهای بر پایه CoFe2O4 با استفاده از روش چاپ جوهرافشانی شده اند که این افزاره ها به چگالی انرژی <sup>2-w</sup>Wh.cm و چگالی توان

> از مهمترین مواد مورد توجه در مطالعات ابرخازنی می توان به ساختارهای بر پایه فلز واسطه کبالت اشاره نمود. این ماده به دلیل فراوانی و در دسترس بودن، قیمت پایین و تهیه ساده از اهمیت ویژه ای برخوردار است. همچنین نانوساختارهای بر پایه کبالت معمولا ظرفیتهای ابرخازنی قابل توجهی را نشان می دهند. به عنوان مثال پنگ و همکاران با سنتز هیدروترمال نانوساختارهای اکسید و هیدروکسید کبالت در کنار یکدیگر موفق به دستیابی به ظرفیت بالای <sup>1</sup>-Fg

> در این کار با استفاده از روش ساده و در دسترس هیدروترمال، نانومکعبهای اکسید کبالت به همراه نانوصفحات هیدروکسید کبالت به صورت همزمان تهیه شده است. بررسی های ساختاری و فیزیکی ماده تهیه شده تشان می دهد که این ماده بسیار مناسب به کاررفتن در تهیه جوهرهای قابل چاپ و استفاده از این جوهرها در ساخت افزاره های میکروابرخازنی بر اساس روش چاپ جوهرافشانی می باشد. همچنین بررسی های الکتروشیمیایی نشان از ظرفیت ویژه ابرخازنی بالای این کامپوزیت در مقایسه با ظرفیت اجزای سازنده آن به صورت مجزا دارد. بررسی افزاره های میکروابرخازنی با چگالی انرژی و چگالی توان مطلوب و همچنین توانایی انعطاف پذیری بالایی را دارد که نوید قابلیت استفاده از این افزاره ها در کاربردهایی نظیر اینترنت اشیا و فناوری های

### روش تجربی

جهت سنتز نانومکعبهای اکسید کبالت و نانوصفحات هیدروکسید کبالت از طریق روش هیدروترمال ابتدا ۱mmol

نیترات کبالت به همراه ۲۰۰mg پلی وینیل پیرولیدون در ۲۰۰ml آب دیونیزه یه خوبی حل شده و محلول به دست آمده به اتوکلاو ۱۰۰ میلی لیتری در دمای ۱۲۰ سانتی گراد و به مدت ۲۶ ساعت منتقل شد. رسوب سیاه رنگ به دست آمده فیلتر شده و به خوبی با آب و اتانول شسته شد.

جهت تهیه نانومکعبها پلی وینیل پیرولیدون استفاده نشد و برای تهیه نانوصفحات از ۱g پلی وینیل پیرولیدون استفاده شد.

ماده کامپوزیتی به دست آمده در تهیه جوهرهای قابل چاپ مورد استفاده قرار گرفت. بدین منظور آب و اتیلن گلایکول به نسبت ۱:۱ با یکدیگر مخلوط شده و مقدار مناسب از پودر ماده فعال جهت تهیه جوهری با چگالی 1-mg.ml م با آن ترکیب شد. جهت همگن سازی این مخلوط از حمام فراصوت به مدت ۲ ساعت استفاده شد.

جهت مطالعه الکتروشیمیایی مواد تهیه شده الکترودهایی بر روی بستر فوم نیکل رسانا و با استفاده از تهیه مخلوطی از ماده فعال، کربن فعال و PVDF به ترتیب به نسبت ۱:۱:۸ استفاده شد. افزاره های ابرخازنی با استفاده از یک دستگاه چایگر

تجاری که به منظور کار تحقیقاتی تغییراتی بر روی آن اعمال شده بود، بر روی کاغد تحریر به چاپ رسیدند. در انتها با تهیه الکترولیت ژل با استفاده از حل نمودن مقدار مناسب پتاسیم هیدروکسید در محلولی متشکل از ۱۰ml آب و ۱g پلی وینیل الکل، و با ریختن مقدار مناسب از ژل به دست آمده بر روی ساختارهای بین انگشتی چاپ شده، افزاره های نهایی ساخته شدند.

به منظور انجام مطالعات ساختاری از تصاویر FESEM و به منظور مطالعه ساختار بلوری ماده از آنالیز XRD استفاده شد. خواص الکتروشیمیایی نمونه ها و افزاره ها توسط تست شارژ و دشارژ GCD، و طیف سنجی امپدانس الکتروشیمیایی EIS، با استفاده از دستگاه پتانسیواستات مورد مطالعه قرار گرفت.

### مطالعات فزیکی و ساختاری

تصاویر FESEM بدست آمده نشان دهنده سنتز موفق نانو مکعبهای اکسید کبالت و نانو صفحات هیدروکسید کبالت به صورت همزمان می باشند(شکل ۱) همچنین ساختارهای همگن

اکسید و هیدروکسید به صورت مجزا با موفقیت تهیه شده و بررسی تصاویر نشان می دهد که ساختار کامپوزیتی تمایل کمتری به باز انباشت دارد که می تواند اثرات مخربی بر روی فعالیت الکتروشیمیایی ماده فعال داشته باشد. همانطور که از تصاویر مشخص است، نانومکعبهای مجزا تمایل زیادی به بازانباشت و ساخت خوشه های بزرگ و همچنین نانوصفخات مجزا تمایل به قرارگرفتن بر روی یکدیگر دارند که هر دوی این پدیده ها می توانند منجر به کاهش سطح فعال الکتروشیمیایی و همچنین کاهش ظرفیت ابرخازنی شوند.



شکل ۱: تصاویر BESEM (a) نانومکعبهای اکسید کبالت (b) نانوصفحات هیدروکسید کبالت (c) کامپوزیت اکسید/هیدروکسید

آنالیز XRD سه نمونه نشان دهنده وجود هر دو فاز اکسید و هیدروکسید کبالت در نمونه کامپوزیت و فازهای خالص در دو نمونه کنترلی نانومکعب و نانوصفحه می باشد(شکل۲a-c).

### مطالعات الكتروشيميايي

الکترودهای ساخته شده بر روی فوم نیکل در یک چینش سه الکترودی و با استفاده از ۳M KOH به عنوان الکترولیت آبی مورد بررسی قرار گرفتند. بر این اساس ماده فعال کامپوزیتی ظرفیت ابرخازنی ویژه حدود Fg<sup>-1</sup> ۹۰۰در چگالی جریان IAg<sup>-1</sup> را از خود نشان می دهد که این ظرفیت ویژه از طریق رابطه-۱ محسابه شده است.

$$C = \frac{I.\Delta t}{m.\Delta V} \tag{1-4}$$

در این رابطه I جریان شارژ، Δt زمان دشارژ، m جرم ماده فعال لایه نشانی شده روی الکترود و ΔV پنجره پتانسیل کاری الکترود می باشد.



شکل ۲: نتایج ARD (a) کامپوزیت (b) نانوصفحات هیدروکسید کبالت (c) نانومکعبهای اکسید کبالت

شکل-۳۵ شامل مقایسه ظرفیت ویژه نمونه ها در چگالی جریانهای متفاوت می باشد و نشان دهنده ظرفیت بالاتر نمونه کامپوزیتی نسبت به اجزای سازنده آن به صورت مجزا می باشد.



شکل۳: (a) ظرفیت ویژه الکترود بر حسب چگالی جریان (b) نمودار دشارژ الکترود بهینه شده

بررسی های الکتروشیمیایی افزاره های ساخته شده در یک چینش دوالکترودی نشان دهنده دستیابی به ظرفیت حدود <sup>2</sup>-۳۰mF.cm در چگالی جریان <sup>2</sup>-۱mA.cm می باشد(شکل-٤) همچنین



محاسبه چگالی جریان و چگالی توان افزاره با استفاده از روابط



شکل ٤: (a) ظرفیت ویژه بر حسب چگالی جریان (b) نمودار شارژ و دشارژ افزاره

مطالعه افزاره ها تحت تنشهای مکانیکی نشان می دهد که افزاره های ساخته شده پس از تحمل خمش و تاشدگی های متناوب میزان بسیار مطلوبی از ظرفیت اولیه خود را همچنان حفظ می کنند. به طور مثال پس از ۱۰۰ بار خمش افزاره تحت زاویه خمش ۹۰ درجه، همچنین ظرفیتی معادل ۹۲ درصد ظرفیت اولیه قابل حصول می باشد(شکل-۵)



شکل٥: ظرفیت بر حسب دفعات خمش در زوایای مختلف

نتيجه گيرى

افزاره های میکروابرخازنی انعطاف پذیر از طریق چاپ جوهرافشانی نانوساختارهای اکسید و هیدروکسید کبالت بر روی کاغذ تحریر و با استفاده از الکترولیت ژل PVA/KOH ساخته شد. این ادوات ذخیره انرژی چگالی انرژی و چگالی توان مطلوبی نشان داده و همچنین تحت تنشهای مکانیکی ناشی از خمش و تاشدگی مقاومت مناسبی را دارا می باشند.

مرجعها

[1] Rani, S., Kumar, N., & Sharma, Y. "Recent progress and future perspectives for the development of micro-supercapacitors for portable/wearable electronics applications." Journal of Physics: Energy, **3**(3), (2021). 032017

[2] Poonam, Sharma, K., Arora, A., & Tripathi, S. "*Review of supercapacitors: Materials and devices.*" Journal of Energy Storage, **21**, (2019). 801–825.

[3] Wang, J., Li, F., Zhu, F., & Schmidt, O. G. "Recent Progress in Micro-Supercapacitor Design, Integration, and Functionalization. Small Methods", (2018). 1800367.





مطالعه اصول اولیه هیدروژن در مونواکسید تیتانیوم حسینی، سید وحید<sup>۲۰۱</sup>؛ محمدیزاده، محمدرضا<sup>۱</sup>؛ پوستنیکوف، آندری<sup>۲</sup> آزمایشگاه پژوهشی ابررسانایی و ابرمواد، دانشکده فیزیك دانشگاه تهران، انتهای خیابان کارگر شمالي، تهران، ایران آزمایشگاه فیزیک شیمی، دانشگاه لورین، بلوار آراگو، متز، فرانسه

#### چکیدہ

در کار حاضر خواص ساختاری، الکترونی و دینامیک هیدروژن در فاز تک میلی مونواکسید تیتانیویم در چارچوب نظریه تابعی چگالی و رهیافت NEB مورد مطالعه قرار گرفت. ساختار مونواکسید تیتانیوم دارای ۱۵ درصد تهی جایی تیتانیوم و اکسیژن است. نتایج نشان می دهد که هیدروژن در جایگاه تهی جایی اکسیژن از نظر انرژی پایدار است و حضور هیدروژن در ساختار باعث ازدیاد حجم بلورمی شود که با شواهد تجربی سازگاری دارد. پنج مسیر برای مهاجرت هیدروژن از تهی جایی اکسیژن از نظر انرژی پایدار است و حضور هیدروژن در مسیری که هیدروژن از کنار تهی جایی تیتانیوم عبور می کرد دارای کمترین انرژی فعالیت است. با این وجود انرژی فعالیت در می و می رو داشت که در این پنج مسیر بالا است و نشان می دهد هیدروژن تا دمای بسیار بالا می تواند در محل تهی جایی اکسیژن به تهی برای ابررساناهای دمای بالا محسوب شود. **واژههای کلیدی:** مونواکسید تیتانیوم ، خواص ساختاری، خواص الکترونی، هیداوژن، این و یو گری می تواند مزیتی برای ابررساناهای دمای بالا محسوب شود.

### First-principles study of Hydrogen in Titanium monoxide

Hosseini, S.Vahid<sup>1,2</sup>; Mohammadizadeh, M.R<sup>1</sup>; Postnikov, Andrei<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Superconductivity Research Laboratory (SLR), Department of Physics, University of Tehran, North Kargar Av., P.O. Box 14395-547, Tehran, Iran <sup>2</sup>LCP-A2MC, Universit\'e de Lorraine, 1 Bd Arago, F-57078 Metz Cedex 3, France https://lpct.univ-lorraine.fr/

#### Abstract

In the present work, the structural, electronic, and dynamic properties of hydrogen TiO in the monoclinic phase were studied in the framework of the density functional theory and NEB method. The structure of titanium monoxide includes 15% vacancy sites of titanium and oxygen. The results show that hydrogen is stable at oxygen vacancy sites energetically, and the presence of hydrogen in the structure causes an increase in the crystal volume, which is consistent with the experimental evidences. There were five paths for the migration of hydrogen from the oxygen vacancy site to the adjacent one, and among these five paths, the path where the hydrogen passed by the titanium vacancy has the lowest activation energy. However, the activation energy in all five paths ranges from 2.87 eV to 3.71 eV, which is very high and shows that hydrogen can be stable at the place of oxygen vacancy sites at very high temperatures. This feature can be considered an advantage for high temperature superconductors.

Keywords: Titanium monoxide, Structural properties, Electronic properties, Hydrogen, NEB

PACS No. 70

تیتانیوم و اکسیژن است که در فاز مکعبی این ماده، این تهی جایی ها به صورت کاتورهای هستند و در فاز تک میلی (که از سرد کردن آهسته این فلز از دمای ۱۵۰۰ درجه سانتی گراد به دمای ۹۰۰ در جه سانتی گراد) به شکل منظمی در می آیند [۲]. در پژوهش جاری مطالعه بر روی فاز تک میلی صورت می گیرد، زیرا نتایج مستقل از مکان تهی جایی ها خواهد بود. وجود تهی جایی ها مکان مناسبی برای قرار گیری هیدروژن است. بنابراین در این پژوهش قصد داریم بهترین مکان برای حضور هیدروژن را بررسی کنیم. سپس نرخ پخش هیدروژن در این ماده مورد توجه قرار می گیرد. به

#### مقدمه

اخیراً ابررساناهای هیدرید فلزی تحت فشار بالا از اهمیت بالایی برخوردار شده اند. زیرا این ابررساناها دارای دمای گذار ابررسانایی نزدیک به دمای اتاق هستند. مطالعات زیادی روی برهمکنش هیدروژن در این فلزات صورت گرفته است که سازوکار ابررسانایی در این مواد را توضیح دهد. در این بین مونواکسید تیتانویم یک ماده ابررسانا با دمای گذار پایین ۵/۵ کلوین گزارش شده است [1]. این ماده دارای ۱۵ درصد تهی جایی اشگان پیشکان پیشی

> طور کلی نتایج نشان می دهد که هیدروژن تا دماهای بالا می تواند در محل تهی جایی باقی میماند و این ویژگی برای ابررساناهای دمای بالا بسیار مناسب است زیرا هیدروژن با فشار بالا در این ابررساناها آلاییده می شود و با توجه به این که فشار بالا است دما نیز در این ساختارها بالا می رود و هیدروژن بایستی در ماده پایدار بماند. با توجه به این که دمای گذار ابررسانایی در مونواکسید تیتاینوم پایین است امید بر این است که حضور هیدروزن بتواند دمای گذار ابررسانایی این ماده را به شدت افزایش دهد.

### روش محاسباتي

محاسبات ابتدا به ساکن بر اساس نظریه تابعی چگالی و با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو [۳] (Quantum ESPRESSO) بر پایه امواج تخت و شبهپتانسیل صورت گرفته است. در محاسبات حاضر، برای توصیف اندرکنش الکترونها با مغزهها شبهپتانسیل فوق نرم اتخاذ گردید. در محاسبات حاضر از تقریب GGA استفاده شده است. مقادیر انرژی قطع تابع موج و چگالی برای همه فازها به ترتیب Ry ۶۰ و Ry ۷۲۰ و همچنین مشبندی نقاط k برای همه ساختارها ۶×۶×۶ انتخاب شد. محاسبات دینامیک هیدروژن با در نظر گرفتن یک ابرسلول در ابعاد ۲×۲×۲ و با استفاده از رهیافت NEB [۲] صورت گرفته است.

### نتايج

شکل ۱ مشخصات بلوری m-TiO به صورت یاخته قراردادی را نشان میدهد. شماره اندیس ها اتم های غیرمعادل را مشخص میکند.



شکل ۱: یاخته قراردادی m-TiO که دارای ۲۰ اتم (۱۰ اتم تیتانیوم و ۱۰ اتم اکسیژن) است. اتمهای تیتانیوم و تهیجایی تیتانیوم به ترتیب با دایره و مربع بـزرگ آبـی و اتمهـای اکسیژن و تهیجایی اکسیژن به ترتیب با دایـره و مربع کوچک قرمـز در صفحه ۰=y و y=۱/۲ مشخص شده است.

مختصات تهیجایی های اکسیژن در (۱،۰/۲، ۱/۲) و (۱/۲، ۲/۱۰) به ترتیب در صفحه ۰=۷ و ۲/۲=۷ و همچنین تهیجایی تیتانیوم در مکانهای (۰،۰۰) و (۰، ۲/۲) به ترتیب در صفحه ۰=۷ و ۲/۲=۷ قرار دارند. در

ابتدا اتم هیدروژن در این تهیجاییها قرار داده شد و انرژی قیدی آن از رابطه زیر محاسبه شد:

### $E_{H}^{\ b}$ = $E_{TiO+H}$ - $E_{TiO}$ - $E_{H}$

که E<sub>H</sub><sup>b</sup> انرژی قیدی هیدروژن در تهیجایی، E<sub>TiO+H</sub> انرژی ساختار در حضور هیدروژن، E<sub>TiO</sub> انرژی کل ساختار TiO و E<sub>H</sub> انرژی کل تک اتم هیدروژن است. مشخصات ساختاری m-TiO و انرژی قیدی هیدروژن در تهیجاییها در جدول ۱ قابل مشاهده است.

جدول ۱: مشخصات ساختاری m-TiO خالص تجربی و محاسباتی و همچنین آلاییده با هیدروژن و انرژی قیدی هیدروژن در تهیجایی Ti و O

			کار حاضر	
پارامترهای شبکه	تجربه [۵]	TiO خالص	TiO آلاييده به هيدروژن	TiO آلاييده به هيدروژن
			در تهىجايى تيتانيوم	در تھیجایی اکسیژن
a/(Å)	٩٫٣۴	٩,٣١	٩٫٣٢	٩٫٣٢
$b/(\text{\AA})$	۴/۱۴	۴,۱۶	۴,۱۶	۴,۱۶
c/(Å)	۵٫۸۵	۵,۸۴	$\Delta_j \Lambda r$	$\Delta_i \wedge \Delta$
γ/(°)	۱۰۷°۳۲'	1.V°44'	۱۰۷°۳۳'	۱۰۷°۳۶'
V/(Å <sup>3</sup> )	۲ ۱۷٫۵۹	۲۱۵/۹۰	Y 10/VV	۲ <i>۱۶</i> , ۴۸
انرژی قیدی	-	-	+•,V۵	$-\Upsilon/\Lambda V$
هيدروژن (eV)				

همان طور که در جدول مشاهده می شود، آلاییدن هیدروژن در تهی جایی ها موجب افزایش اندکی حجم در ساختار m-TiO می شود که با تجربه سازگار است [۵]. به صورت کمی، حضور هیدروژن در تهی جایی اکسیژن موجب افزایش طول پیوندی Ti3-Ti7 از ۳/۹۰ به ۳/۹۵ آنگستروم می شود، در حالی که طول پیوندی Ti1-Ti5 تقریباً تغییری نمی کند. همچنین از انرژی قیدی هیدروژن واضح است که هیدروژن از نظر انرژی جایگاه تهی جایی اکسیژن را کاملاً ترجیح می دهد که این نتیجه با تجربه در سازگاری کامل است. حال قصد داریم این قضیه را از نظر الکترونی مورد بررسی قرار m-TiO الکترونی ساختار Ti0-Ti0

همان طور که در شکل بالا مشاهده می شود، ساختار m-TiO آلاییده با هیدروژن در هر دو تهی جایی تیتانیوم و اکسیژن رفتار فلزی از خود نشان می دهد که با آزمایش های تشدید مغناطیسی هسته کاملاً مطابق است [۵]. با توجه به شکل واضح است که در حالت آلایش هیدروژن در تهی جایی تیتانیوم منحنی اسپین بالا و پایین به ترتیب در حالتهای اشغال نشده و اشغال شده قرار دارند و یکدیگر را خنثی نمی کنند. سیستم در این حالت مغناطش ه۱۷ را به خود می گیرد که نشان می دهد اتم هیدروژن به اتم های



تیتانیوم اطراف پیوندی برقرار نکرده است. در واقع منشأ ایجاد مغناطش در این سیستم میتواند ناشی از اثر تبادلی قوی بین اتمهای تیتانیوم باشد که در تجربه این ساختار پارامغناطیس است و یا گواه وجود ناپایداری در m-TiO باشد که منشأ دوم منطقی تر به نظر میرسد.



ل ۲: منحنی چگالی حالتهای m-TiO آلاییده با هیدروژن در پنجره بالا: تهیجایی تیتانیوم و پنجره پایین: تهیجایی اکسیژن

بنابر تقارن ساختار، برای مهاجرت هیدروژن از یک تهی جایی به تهی جایی دیگر پنج مسیر وجود دارد که در شکل ۳ دیده می شود. همچنین محاسبات NEB برای هر پنج مسیر در شکل ۴ مشاهده می شود. محاسبات در دو مرتبه یکی برای ۱۳ تصویر و دیگری ۲۵ تصویر انتخاب شده است تا از همگرایی انرژی فعالیت اطمینان کامل برقرار شود. همان طور که انتظار می رود همه مسیرهای انرژی دارای تقارن آینه ای هستند زیرا حرکت هیدروژن در هر مسیر متقارن است. برای مسیر ۴ و ۵ با زیرا حرکت هیدروژن در هر مسیر متارن است. برای مسیر ۴ و ۵ با محاسبات ۱۳ تصویر این تقارن حاصل نمی شود که با افزایش تصاویر تا ۲۵ نقطه این تقارن به دست می آید. همان طور که پیش بینی می شد، مسیر دوم دارای کمترین انرژی فعالیت eV

هیدروژن از کنار تهیجایی تیتانیوم عبور میکند و با کمترین سد پتانسیل همراه است. همچنین میتوان مشاهده کرد که به خاطر اینکه هیدروژن از وجوه O-Ti-O-Ti حرکت میکند فشرده شده و دارای انرژی فعالیت بیشتری نسبت به مسیر دوم است. با توجه به شکل مشخص است که مسیر ۴ و ۵ مشابه یکدیگر هستند زیرا انرژی فعالیت در این دو مسیر عبور اتم هیدروژن از محل تهیجایی تیتانیوم است.



شکل ۳: (الف): نمای کلی ساختار m-TiO در صفحات y=۱/۴ و y=۱/۴. ساختار -m TiO دارای ۲۴ شبهه مکعب است که هیدروژن میتواند در بین این شبهه مکعبها جای گیرد. (ب): پنج مسیر ارائهشده برای پخش هیدروژن از یک تهیجایی اکسیژن به تهی جایی اکسیژن مجاور

گودی ایجاد شده در مسیرهای ۴ و ۵ به خاطر این است که هیدروژن از محل تهی جایی تیتانیوم حرکت می کند که این نقطه یک مکان شبه پایدار است. به طور کلی انرژی فعالسازی در همه مسیرها بسیار بزرگ است. این بدان معنی است که هیدروژن در دماهای بسیار بالا می تواند در تهی جایی اکسیژن بماند و ساختار پایدار باشد. بنابراین این ویژگی برای ذخیره سازی هیدروژن مناسب نیست، بلکه برای استفاده در ابررساناهای دمای بالا می تواند کاربردی باشد. زیرا ابررساناهای دمای بالا بر پایه هیدروژن معمولاً تحت فشار بالا قرار می گیرند و این فشار بالا باعث افزایش دما در درون ساختار می شود. نرخ پخش هیدروژن از معادله زیر حساب می شود [8]:

 $D=v \exp(-E_a/k_B T)$ 

که  $E_a$  انرژی فعال سازی،  $K_B$  ثابت بولتزمن، T دما و v پیش فاکتور بسامد  $e^{s^{-1}}$  است که بسته به نوع واکنش (برای مثال در فرایند جذب تقریباً در مرتبه  $e^{-s}$  است که بسته به نوع واکنش (برای مثال در فرایند جذب تقریباً در مرتبه  $e^{-s}$  ا $e^{-s}$  است که بسته به نوع واکنش (برای مثال در فرایند جذب تقریباً در مرتبه  $e^{-s}$  ا $e^{-s}$  است) عددی متفاوت است. با استفاده از معادله بالا و عدد تجربی پیش فاکتور بسامد  $e^{-s}$   $e^{-s}$ 



شکل ۴: محاسبات NEB برای پنج مسیر عبور هیدروژن از تهیجایی اکسیژن به تهیجایی مجاور برای ساختار m-TiO که دارای ابریاخته ۲×۲×۱ و شامل ۸۱ اتم است. تعداد نقاط تصویری ۱۳ و ۲۵ انتخاب شدهاند که به ترتیب با کره تو پر قرمز و کره توخالی آبی نشان داده شدهاند.

علت دیگر وجود تخلخل در ماده تجربی است که در محاسبات حاضر این واقعیت در نظر گرفته نشده است. همچنین نمونه تجربی به صورت بس بلور است در صورتی که محاسبات حاضر بر روی تک بلور صورت گرفته است. از طرف دیگر چون محاسبات حاضر اثرات کوانتومی هیدروژن به خاطر

جرم سبک آن را در نظر نگرفته است، امکان اختلاف با تجربه وجود خواهد داشت.

### نتيجەگيرى

در این مقاله به موضوع دینامیک هیدروژن در ساختار m-TiO پرداخته شد. ساختار m-TiO دارای ۱۵ درصد تهی جایی تیتانیوم و اکسیژن است. مطالعات اصول اولیه نشان داد که هیدروژن تهی جایی اکسیژن را نسبت به تهی جایی اکسیژن ترجیح می دهد. همچنین مادامی که هیدروژن در جایگاه تهی جایی اکسیژن قرار بگیرد مغناطش سیستم صفر است که با تجربه سازگاری دارد زیرا ساختار TiO در تجربه غیر مغناطیسی است. برای مرارسی دینامیک هیدروژن از یک تهی جایی اکسیژن به تهی جایی اکسیژن محاور با استفاده از محاسبات NEB پنج مسیر وجود دارد. از میان این پنج مسیر، هیدروژن مسیری را انتخاب می نماید که از کنار تهی جایی اکسیژن میگذرد و این مسیر کمترین انرژی فعالسازی (V/۸۷ eV) را برای هیدروژن دارد. همچنین محاسبات MEB در مجموع نشان می دهد که میگذرد و این مسیر کمترین انرژی فعالسازی (V v v) را برای انرژی فعالیت هیدروژن در بلور TiO سیالا است و همین نکته بیانگر این انرژی فعالیت هیدروژن می تواند تا دماهای بالا در ساختار پایدار بماند. این است که هیدروژن می تواند تا دماهای بالا در ساختار پایدار بماند. این ویژگی می تواند برای استفاده عملی این ساختار به عنوان ابررساناهای دمای بالا مناسب باشد.

سپاسگزاری

از حمایت مالی معاونت پژوهشی دانشگاه تهران و مرکز محاسباتی دانشگاه لورین فرانسه تشکر میکنیم .

منابع

[v]. D. Wang, C et al., ACS omega 2, 1036 (2017)..

[Y]. D. Watanabe, J et al., Acta Crystallographica **23**, 307 (1967).

[r]. Giannozzi, et al, *Journal* of *Physics: Condensed Matter*. 21, 395502 (2009)..

[\*]. D. Sheppard, R et al., The Journal of Chemical Physics **128**, 134106 (2008)..

[ $\delta$ ]. A. V. Skripov, A et al., Journal of Alloys and Compounds **887**, 161353 (2021).

[۶]. R. Gomer, Reports on Progress in Physics 53, 917 (1990).

[v]. Vondrák, J, Electrochimica acta, **32**, 163-170 (1987).





بررسي عملكرد سلول هاي خورشيدي آلي نيمه شفاف بريايه بلورفتوني عنابی میلانی ، المیرا <sup>۲۰۱</sup>؛ پیرعلایی ، مینا<sup>۲</sup>؛ راعیانی ، داود<sup>۲۰۱</sup>؛ عسگری ، اصغر <sup>۱و۲و۳</sup> ادانشکاره فیزیک، دانشگاه تیریز، ایران المحروه تحقیقاتی ادوات فوتونیکی، پژوهشکده فیزیک کاربردی و ستارهشناسی، دانشگاه تبریز، ایران سمروه میکروالکترونیک، دانشگاه استرالیای غربی، استرالیا

### چکیدہ

برای بهبود جذب نوری سلولهای خورشیدی نیمه شفاف آلی، لایه فعال در یک میکروکاواکهای نیمه شفاف قرار داده شده است که این میکروکاواک از یک الکترود چندلایه MoO3/Ag/MoO3 و الکترود نازک Ag که توسط بلورهای فوتونی یک بعدی پوشیده شده است ساخته می شود. محاسبات نشان می دهد که بهره تبدیل توان سلولهای خورشیدی نیمه شفاف کاواک دار تا ۷/۲۸ ٪ نسبت به سلولهای خورشیدی بدون میکروکاواک بهبود یافته است.

### Investigating the Performance of Semi-Transparent Organic Solar Cells Based on Photonic Crystal Annabi Milani, Elmira<sup>1,2</sup>; Piralaee, Mina<sup>2</sup>, Raeyani, Davoud<sup>1,2</sup>; Asgari, Asghar<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup> Faculty of Physics, University of Tabriz, Iran
 <sup>2</sup> Photonics Devices Research Group, Research Institute of Applied Physics and Astronomy, University of Tabriz, Iran
 <sup>3</sup> Microelectronics Group, University of Western Australia, Australia

#### Abstract

Semi-transparent microcavities are fabricated by sandwiching an active layer between a MoO3/Ag/MoO3 multilayer electrode and a thin Ag electrode covered by 1D photonic crystals to improve the light absorption of organic semi-transparent solar cells. Theoretical calculations show that the power conversion efficiency of the semi-transparent solar cells is improved up to 7.28%, which is better than that of conventional solar cells without microcavity.

Keywords: Microcavity, organic semi-transparent solar cells, photonic crystals.

PACS No.(70)

ساختمان اداری خود برق تولید کنیم. چیزی که شبیه یک رویای دور به نظر میرسد، به لطف پنلهای خورشیدی شفاف در راه تبدیل شدن به واقعیت است. سلولهای خورشیدی آلی نیمه شفاف به دلیل مزایایی مانند هزینه کم، ساخت آسان و انعطاف پذیری و نیز کاربردهای بالقوه آنها برای پنجرههای تولید برق ساختمانها و

مقدمه

دنیایی را تصور کنید که در آن می توانیم بااستفادهاز سطح پنجرهها، گوشی های هوشمند، سقف خورشیدی خودرو یا سقف شیشهای



خودروها توجه زیادی را به خود جلب کردهاند [۱-۲]. یکیاز مسائل کلیدی در ساخت این نوع دستگاهها، ایمنسازی یک الکترود شفاف مناسب برای حفظ شفافیت و کارایی بالای سیستم است. سلولهای خورشیدی نیمه شفاف نیاز دارند که هم اتصالات جلویی و هم اتصالات پشتی در یک محدوده طیفی گسترده -UV VIS-NIR شفاف باشند. الکترودهای شفاف پشتی باید با در نظر گرفتن ویژگیهای مواد نیمهرساناهای آلی انتخاب شوند. برای این منظور بلورهای فوتونی یک بعدی (1DPC) گزینهی مناسبی برای استفاده در سلولهای خورشیدی شفاف هستند. اگرچه ساخت استفاده در سلولهای خورشیدی شفاف هستند. اگرچه ساخت ایجاد می کند. مزیت این ساختار در به دام انداختن نور است زیرا 1DPCها می توانند عملکرد نوری سلولهای خورشیدی آلی نیمه شفاف را به طور قدرتمند مدیریت کنند.

1DPCها می توانند تمام فو تونهای فرودی را برای باز جذب در لایه فعال باز تاب دهند و کارایی دستگاه را افزایش دهند. لایه فعال سلولهای خورشیدی نیمه شفاف نمی تواند نور منعکس شده توسط 1DPCها را به طور کامل جذب کند زیرا ضخامت لایه فعال به دلیل طول کو تاه انتشار اکسایتون و تحرک کم حامل مواد آلی محدود شده است. برای به حداکثر رساندن جذب فو تون در لایه فعال با ضخامت محدود، مطالعات قبلی رویکردهای به دام انداختن نور را بر اساس پلاسمونهای سطحی، فاصله دهنده های نوری و میکروکاواک نوری توسعه داده اند [۳–٤]. تحقیقات نشان داده است که میکروکاواک نوری می تواند فو تون های به طور قابل داخل دستگاه محدود کند و جذب نور را در لایه فعال به طور قابل سلولهای خورشیدی آلی مات معمولی اعمال شده اند.

هدف این مقاله توسعه ساختار بهدام انداختن نور برای افزایش جذب فوتونها در سلولهای خورشیدی آلی نیمهشفاف است. برای این منظور، یک ساختار میکروکاواک سلولهای خورشیدی آلی نیمهشفاف با ساندویچ کردن یک لایه فعال بین الکترود چند لایه MoO3/Ag/MoO3 و الکترود Ag که توسط 1DPC پوشیده شده است، ساخته می شود.

روش کار

سلولهای خورشیدی نیمه شفاف مورد بررسی مبتنی بر 1DPCs با میکروکاواک دارای ساختار زیر است:

Glass/M 0O3(I)/Ag/MOO3(II)/ActiveLayer/ TiO2/Ag/LiF/1DPC فیلمهای نازک Ag بهعنوان کاتد و آند (I) MOO3(I) استفاده می شوند که MoO3/Ag بهعنوان لایه ضد انعکاس ورودی با ضخامت ۲۰۱۰ نانومتر و (II)MOO3 بهعنوان لایه انتقال حفره با میخامت ۳۰ نانومتر تنظیم شده. عمل می کند و Ag/LiF/1DPC بهعنوان لایه ضد انعکاس خروجی که Ag با ضخامت ۱۰ نانومتر برای ساختن میکروکاواک نیمه شفاف و سپس بهبود عملکرد نوری سلولهای خور شیدی نیمه شفاف عمل می کند.

ضخامت لایه انتقال الکترون TiO<sub>2</sub> برابر ۱۰ نانومتر و ضخامت لایه فعال (PBDB-T: ITIC) ۱۰۰ نانومتر در نظر گرفته شده است. فیلم LiF بین کاتد Ag به ضخامت ۱۰ و 1DPC، ساندویچ می شود تا فاز انعکاس 1DPCها را تنظیم کند که این لایه به عنوان لایه تطبیق فاز PML نامیده می شود. فرض بر این است که 1DPCها از جفتهای WO<sub>3</sub>/LiF که تعداد جفتهای آن در این مقاله متغیر انتخاب شدهاند تشکیل شود، همانطور که در شکل (۱) دیده می شود.



شکل ۱: (الف) ساختار سلولهای خورشیدی نیمه شفاف مبتنی بر 1DPCبا ساختار میکروکاواک. (ب) ساختار میکروکاواک درون ساختار. 1 و t2 به ترتیب ضریب عبور آینه های ورودی و خروجی را نشان می دهند. r1 و r2 به ترتیب ضریب بازتاب آینه های ورودی و خروجی را نشان می دهند.


### بحث و نتايج

برای محاسبه پارامترهای عملکرد دستگاه مانند جریان اتصال کوتاه، Jsc، ولتاژ مدار باز، Voc، ضریب پرشدگی FF و راندمان تبدیل توان PCE، از مدل drift-diffusion استفاده کردیم که در آن، علاوهبر در نظر گرفتن چگالی از اکسیتونها، جابجایی آنها در نظر گرفته می شود. مدل مورد استفاده به طور گسترده در مقالات قبلی ما توضیح داده شده است[۷و۸] و نیز مدلسازی این ساختار عبور نور از لایهها و کل سیستم با استفاده از روش ماتریس انتقال، [25]TMMمحاسبه می شود.

در این کار ما سیستم مورد مطالعه را برای حالت بدون بلور فوتونی و نیز با ۸ جفت بلور فوتونی WO3/LiF محاسبه کرده و نتایج را مقایسه کردهایم. برای این کار در حضور عبور لایه فعال میزان عبور سایر لایه های سلول خورشیدی و همچنین میزان عبور کل ساختار در ناحیه متوسط مرئی در شکل ۲ نشان داده شده است. میزان عبور در حضور بلور فوتونی برای تمامی طول موج ها کاهش یافته است اما این کاهش برای ناحیه حساس چشمی (رنگ نارنجی شکل ۲) در مقایسه با سایر نواحی کمتر است.

در مرحله بعدی اثرات تعداد لایه های بلور فوتونی را بررسی کرده ایم. ساختار را با تعداد لایه های بلور فوتونی از ٤ تا ٢٠ جفت لایه بررسی و نتایج مربوطه را در شکل ٣ نمایش داده ایم . نتایج نشان می دهد که تعداد لایه های بلور فوتونی تاثیر زیادی در شفافیت کلی و لذا در پارامتر های اساسی سلول خورشیدی ایجاد نمی کند اگرچه رفتار T در طول موج های مختلف تا حدودی متفاوت از هم است. برای بررسی اثر تعداد لایه های بلور فوتونی در بهره تبدیل توان PCE و متوسط عبور ناحیه مرئی AVT سلول های خورشیدی نیمه شفاف، بررسی و در شکل ٤ گزارش شده است

محاسبات نشان می دهد که حضور یک بلور فوتونی ٤ جفت لایه در ساختار هم می تواند باعث تغییر در مقدار PCE و AVT شود بطوری که PCE از مقدار ٥/٦٩ تا ٧/٥٠ افزایش یافته و AVT از ۲۱/۱۹به ۲۷/۲۸ کاهش یافته است. با افزایش تعداد لایهها تغییر چندانی در PCE و AVT ایجاد نمی شود. بنابراین با

میکروکاواک حتی با تعداد جفتلایه اندک (حداقل دو جفت) میتوان PCE را افزایش داد.



شکل۲ : طیف عبور محاسبهشده لایه فعال (۱۰۰ نانومتر)، بدون بلور فوتونی، (خط آبی) با حضور بلور فوتونی (خط سبز)، تحت تابش طیفی AM1.5 و حساسیت چشمی (λ) SAM1.5 .(λ).



شکل۳ : طیف عبوری سلول خورشیدی بدون میکروکاواک و میکروکاواک های ٤ تا ۲۰ جفت لایه.





مرجعها

[1] Z. He, C. Zhong, S. Su, M. Xu, H. Wu, Y. Cao, Enhanced power-conversion efficiency in polymer solar cells using an inverted device structure, Nat. Photonics 6(2012) 591–595.

[2] Q. Tai, F. Yan, Emerging semitransparent solar cells: materials and device design, Adv. Mater. 29 (2017) 170012.

[3] Y. Long, Red and near-infrared absorption enhancement for low bandgap polymer solar cells by combining the optical microcavity and optical spacers, Sol.

Energy Mater. Sol. Cells 95 (2011) 3400–3407.

[4] Y. Long, Effects of metal electrode reflection and layer thicknesses on the performance of inverted organic solar cells, Sol. Energy Mater. Sol. Cells 94 (2010)744\_749.

[5] Y. Long, Improving optical performance of low bandgap polymer solar cells by the two-mode moderate microcavity, Appl. Phys. Lett. 98 (2011) 033301-1–033301-3.

[6] Çetinkaya, Çağlar, Erman Çokduygulular, Barış Kınacı, Serkan Emik, Nihan Akın Sönmez, and Süleyman Özçelik. "Enhancement of color and photovoltaic performance of semi-transparent organic solar cell via fine-tuned 1D photonic crystal." Scientific Reports 12, no. 1 (2022): 1-13.
[7] M. Piralaee and A. Asgari, "Bimetallic core–shell nanoparticles to improve the absorption of P3HT: PCBM organic solar cell," Appl. Opt., vol. 60, no. 29, p. 9087, 2021.

[8] Milani, Elmira Annabi, Mina Piralaee, Sohrab Ahmadi, and Asghar Asgari. "The role of structural parameters on efficiency and transparency of semi-transparent non-fullerene organic solar cell." Scientific Reports 12, no. 1 (2022): 1-11.



شکل ٤: نمودار تغییرات PCE و AVT سلولهای خورشیدی نیمه شفاف بر حسب تعداد جفتلایه های بلورفوتونی از ۰ تا ۳۰.

## نتيجه گيري

ما در این مقاله ساختاری با هدف به دام انداختن نور بااستفاده از میکروکاواک نیمه شفاف برای سلولهای خور شیدی نیمه شفاف را بررسی کرده ایم. این ساختار با ساندویچ کردن یک لایه فعال بین الکترود چند لایه MoO<sub>3</sub>/Ag/MoO<sub>3</sub> و الکترود نازک Ag که توسط 1DPCs پوشیده شده است، ساخته شده است. شبیه سازی ها نشان می دهد که این ساختار می تواند جذب نور سلولهای خور شیدی نیمه شفاف را بهبود ببخشد. در نتیجه، سلولهای خور شیدی نیمه شفاف را بهبود ببخشد. در نتیجه، شفافیت ۱۷/۲۸ درصد به دست می آیند. همچنین افزایش تعداد جفت لایه ها تغییر چندانی در PCE و AVT ایجاد نمی کند.





## تخت شدگی نوار ظرفیت در شبکه مربعی دو بعدی اندر کنشی۔ آلیاژی

**ربیع بیگی ، پوریا<sup>1و2</sup> ؛ مرادیان، رستم<sup>1و2</sup>** <sup>1</sup> دانشگاه رازی کرمانشاه ،دانشکده علوم ، گروه فیزیک <sup>2</sup> دانشگاه رازی کرمانشاه ، مرکز تحقیقات علوم و فناوری نانو

#### چکیدہ

سیستم های بس ذره ایی که در آن ها اندرکنش کولنی و پتانسیل آلیاژی وجود دارد ، از اهمیت ویژه ایی در فیزیک ماده چگال برخوردار هستند ، چرا که سیستم های واقعی زیادی وجود دارند که به صورت شبکه های اندرکنشی-آلیاژی رفتار می کنند. در این پروژه ، با استفاده از روش کوانتوم مونت کارلو در تقریب تک سایتی DMFT+CPA و تقریب چند سایتی BEMSCA ساختار نواری شبکه مربعی دو بعدی در برخی شدت های خاص مورد بررسی قرار می گیرد. رقابت اندرکنش کولنی و پتانسیل آلیاژی ، منجر به ایجاد فازهای مختلفی در ماده می شود. نتایج ما نشان می دهد که در برخی شدت های خاص نوار ظرفیت دچار تخت شدگی در نزدیکی سطح فرمی می شود، که می تواند کاندیدای مناسبی برای توضیح مکانیزم ابررسانایی دمای بالا باشد.

**واژه های کلیدی**: تخت شدگی ، نوار ظرفیت، اندرکنش کولنی ،پتانسیل آلیاژی، تقریب میدان متوسط دینامیکی ،تقریب پتانسیل همدوس ، تقریب فراتر از سوپرسل محیط موثر

Flattening of the valence band in two-dimensional interaction-alloy square lattice

Poorya Rabibeigi<sup>1,2</sup>, Rostam Moradian<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Physics Department, Faculty of Science Razi University, Kermanshah, Iran.

<sup>2</sup>Nano Science and Nano Technology Research Center, Razi University, Kermanshah, Iran.

#### Abstract

Many-particle systems, in which there are Coulomb interaction and alloy potential, have a great importance in condensed matter physics, because there are many real systems that behave as interactionalloy lattice. In this project, using the quantum Monte Carlo method in DMFT+CPA single-site approximation and BEMSCA multi-site approximation, the band structure of the two-dimensional square lattice is investigated in some specific intensities. The competition of Coulomb interaction and alloy potential leads to the creation of different phases in the material. Our results show that at certain intensities, the valence band is flatten near the Fermi level, which can be a good candidate to explain the mechanism of high temperature superconductivity.

*Keywords:* Flattening, valance band, Coulomb interaction, alloy potential, dynamic mean field theory, Coherent Potential Approximation, beyond effective medium supercell approximation

PACS No. 70,74



## پتانسیل همدوس<sup>4</sup> (CPA) [17] برای سیستم آلیاژی ، و تقریب چند سایتی فراتر از تقریب ابرسلول محیط موثر<sup>6</sup>(BEMSCA) [18]، ساختار نواری شبکه مربعی دوبعدی اندرکنشی-آلیاژی را مورد بررسی قرار می دهیم. که می توان از طریق این ساختار نواری در برخی شدت های خاص ، تخت شدگی نوارها را نشان داد.در روش کوانتوم مونت کارلو ، زنجیره ایی از پیکربندی های احتمالی تولید می شوند. این پیکربندی های تولید شده ، توسط الگوریتم موند. زنجیره پیکربندی های پذیرش یا رد می شوند. زنجیره پیکربندی های پذیرفته شده را زنجیره محام گرمایی(یا الگوریتم متروپولیس) ، پذیرش یا رد می Markov می گویند. این پیکربندی های پذیرفته شده ، در استفاده می شوند[21, 19, 20].

$$\bar{G}(\tau, \tau') = \frac{1}{N_a} \sum_{i=1}^{N_a} G_i(\tau, \tau')$$
 (2)

محاسبه ساختارنواري

خروجی روش های مذکور ، خود-انرژی<sup>۲</sup> فرکانس موهومی ، DMFT+CPA خود-انرژی مستقل ازبردار موج است[21]. با استفاده از این خود-انرژی می توان تابع گرین متوسط فرکانس موهومی را محاسبه کرد.

$$\bar{G}(n\vec{k};i\omega_{n}) = [(G^{0}(n\vec{k},i\omega_{n}))^{-1} - \Sigma(\vec{k},i\omega_{n})]^{-1} \quad (3)$$

قسمت موهومی خود-انرژی در این تقریب ها ، صفر نیست بنابراین قسمت موهومی نیز درمحاسبه ساختارنواری نورمال نقش مهمی دارد. چگالی حالات به صورت زیر در می آید.

$$N(n\vec{k},E) = \frac{-1}{\pi} \operatorname{Im} \overline{G}(n\vec{k},E+i\eta)$$
(4)

#### مقدمه

سیستم های واقعی زیادی وجود دارند که در آن ها اندرکنش کولنی و پتانسیل آلیاژی به صورت همزمان وجود دارند [1-7].رفتار الکترونیکی شبکه دو بعدی در حضور اندرکنش کولنی و پتانسیل آلیاژی به خوبی شناخته شده است ، که در آن اندرکنش کولنی منجر به گذار به فاز عایق مات و پتانسیل آلیاژی بزرگ منجر به گذار به فاز عایق اندرسون میشود [8-11] ، اما حضور همزمان اندرکنش کولنی و پتانسیل ناخالصی در شبکه و رقابت آن ها در تغییر فاز سیستم ، مساله پیچیده ایی است. هامیلتونی برای سیستم اندرکنشی – آلیاژی به صورت زیر است.

$$\hat{H} = \sum_{\substack{ij\\\sigma}} t_{ij} \Big[ \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} + \text{H.C.} \Big] + u \sum_{i} \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \sum_{i\sigma} (\epsilon_{i} - \mu) \hat{n}_{i\sigma}$$
(1)

که در آن u اندرکنش کولنی محلی روی سایت های شبکه است.  $\mu$  پتانسیل شیمیایی است که در حالت باند نیمه پر  $\mu=u/2$  است.  $\delta_i$  انرژی برجایگاهی تصادفی آلیاژی است  $\mu=u/2$  مالت.  $\delta_i$  انرژی برجایگاهی تصادفی آلیاژی است که برای سایت های میزبان مقدار 2/ $\delta$  را با به خود می گیرد و برای سایت های مهمان مقدار 2/ $\delta$  را با احتمال c به خود می گیرد. روش های تقریبی زیادی برای بررسی این مدل هامیلتونی وجود دارد. روش کوانتوم مونت کارلو با استفاده از الگویتم هیریش – فای<sup>۲</sup> ، روش مناسبی برای مطالعه این مدل هامیلتونی می باشد[21–15] . ما در این کار ، با استفاده از روش کوانتوم مونت کارلو با پارامترهای T/t=0.28 و 2.0=c برای حل تابع گرین ناخالصی در تقریب تک سایتی تئوری میدان متوسط دینامیکی<sup>۳</sup> (DMFT) [16] برای سیستم اندرکنشی و تقریب

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Coherent Potential Approximation

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup> Beyond Effective Medium Supercell Approximation

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup> Self energy

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Mott

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Hirsch - Fye

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Dynamic Mean Field Theory



با استفاده از این چگالی حالات ، به ازای هر بردار موج ، انرژی ایی که این تابع طیفی را بیشینه کند ، ساختار نواری در آن بردار موج مورد نظر می باشد[18].

$$E_{n,\vec{k}} = N(\vec{k}; E)|_{mth_max\,imum}$$
(5)

نتايج

رقابت اندرکنش کولنی و پتانسیل آلیاژی ، فازهای مختلفی در سیستم ایجاد می کند.در غیاب اندرکنش کولنی، برای شدت پتانسیل آلیاژی به اندازه کافی بزرگ ، هردو تقریب تک سایتی و چند سایتی ، فاز عایق اندرسون را نشان می دهند و این موضوع با تجربه در توافق است ، چرا که پتانسیل آلیاژی به اندازه کافی بزرگ ، فاز عایق اندرسون را به شبکه القا میکند. با ورود اندرکنش کولنی ، در شدت اندرکنش بحرانی اول ، گذار فاز عایق - فلز اتفاق می افتد. شکل (1) ساختارنواری شبکه را در این شدت اندرکنش بحرانی برای دو تقریب نشان می دهد.



شکل 1 : ساختار نواری شبکه مربعی دو بعدی برای شدت پتانسیل آلیاژی  $\delta = 4.0 \mathrm{t}$  در شدت اندرکنش بحرانی

برای مشاهده تخت شدگی نوار ظرفیت ، در شکل (2) کنتور رنگی نوار ظرفیت موجود در شکل (1) را رسم میکنیم.



شکل 2 : کنتور رنگی نوار ظرفیت در شدت اندرکنش بحرانی برای تقریب تک سایتی DMFT+CPA و تقریب چند سایتی BEMSCA

نمودارهای بالا و سمت راست کنتور ها در شکل (2) ، ساختارنواری در مسیرهای قائم و افقی را که از مرکز منطقه اول بریلوئن عبور می کنند، را نشان می دهد. با توجه به این نمودارها ، تخت شدگی در هردو تقریب تک سایتی و دو سایتی اتفاق می افتد ، اما این تخت شدگی در تقریب چند سایتی بیشتر است. تخت شدگی نوار ظرفیت در سطح فرمی ، به معنای افزایش قابل توجه چگالی حالات در سطح فرمی است، که می تواند کاندیدای مناسبی برای توضیح ابررسانایی دمای بالا باشد.





- .8 Lee, H., H.O. Jeschke, and R. Valentí, Competition between disorder and Coulomb interaction in a twodimensional plaquette Hubbard model. Physical Review B, 2016. 93(22): p. 224203.
- .9 Anderson, P.W., *Absence of diffusion in certain random lattices*. Physical review, 1958. **109**(5): p. 1492.
- .10 Altshuler, B.L., A.G. Aronov, and P. Lee, *Interaction effects in disordered Fermi systems in two dimensions*. Physical Review Letters, 1980. **44**(19): p. 1288.
- .11 Kramer, B. and A. MacKinnon, *Localization: theory and experiment*. Reports on Progress in Physics, 1993. **56**(12): p. 1469.
- .12 Hirsch, J., et al., *Efficient Monte Carlo procedure for* systems with fermions. Physical Review Letters, 1981. **47**(22): p. 1628.
- .13 Hirsch, J., Stable Monte Carlo algorithm for fermion lattice systems at low temperatures. Physical Review B, 1988. **38**(16): p. 12023.
- .14 Scalapino, D. and R. Sugar, *Method for performing Monte Carlo calculations for systems with fermions*. Physical Review Letters, 1981. **46**(8): p. 519.
- Hirsch, J.E., et al., Monte Carlo simulations of onedimensional fermion systems. Physical Review B, 1982.
   26(9): p. 5033.
- .16 Vollhardt, D., *Dynamical mean-field theory for correlated electrons*. Annalen der Physik, 2012. **52** :(1)4 p. 1-19.
- .17 Yonezawa, F. and K. Morigaki, *Coherent potential approximation. Basic concepts and applications.* Progress of Theoretical Physics Supplement, 1973. **53**: p. 1-76.
- .18 Moradian, R. and P. Rabibeigi, *How electrons Coulomb repulsion changes graphene band structure*. Scientific Reports, 2022. **12**(1): p. 1-12.
- .19 Hirsch, J.E. and R.M. Fye, *Monte Carlo method for magnetic impurities in metals*. Physical review letters, 1986. **56**(23): p. 2521.
- .20 Hirsch, J.E., Discrete Hubbard-Stratonovich transformation for fermion lattice models. Physical Review B, 1983. **28**(7): p. 4059.
- .21 Müller-Hartmann, E., *Correlated fermions on a lattice in high dimensions*. Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, 1989. **74**(4): p. 507-512.

نتیجه گیری

در این پروژه ، با استفاده از شبیه سازی کوانتوم مونت کارلو در تقریب تک سایتی DMFT+CPA و تقریب چند سایتی BEMSCA ، ساختار نواری شبکه مربعی دو بعدی اندرکنشی-آلیاژی در شدت اندرکنش بحرانی ، محاسبه شده است. در این شدت خاص ، نوار ظرفیت برای هردو تقریب ، دچار تخت شدگی در سطح فرمی شده است. این تخت شدگی ، برای تقریب چندسایتی بیشتر است. تخت شدگی نوار ظرفیت در سطح فرمی معادل افزایش چگالی حالات در این سطح است ، که می تواند کاندید مناسبی برای توضیح ابرسانایی دمای بالا باشد.

#### مرجع ها

- .1 Mott, N.F., *The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals.* Proceedings of the Physical Society. Section A, 1949. **62**(7): p. 416.
- .2 Lee, P.A. and T. Ramakrishnan, *Disordered electronic* systems. Reviews of modern physics, 1985. **57**(2): p. 287.
- .3 Efros, A.L. and M. Pollak, *Electron-electron interactions in disordered systems*. 2012: Elsevier.
- .4 Belitz, D. and T. Kirkpatrick, *The anderson-mott transition*. Reviews of modern physics, 1994. **66**(2): p. 261.
- .5 Abrahams, E., S.V. Kravchenko, and M.P. Sarachik, *Metallic behavior and related phenomena in two dimensions*. Reviews of modern physics, 2001. **73**(2): p. 251.
- .6 Muthukumar, K., et al., Spontaneous dissociation of Co2 (CO) 8 and autocatalytic growth of Co on SiO :2A combined experimental and theoretical investigation. Beilstein journal of nanotechnology, 2012. **3**(1): p. 546-555.
- .7 Muthukumar, K., R. Valentí, and H.O. Jeschke, Simulation of structural and electronic properties of amorphous tungsten oxycarbides. New Journal of Physics, 2012. 14(11): p. 113028.





## ترکیبات پایدار هیدریدهای پالادیوم در فشار صفر با استفاده از داده کاوی

<sup>1</sup> **عرب نصرت آبادی، حامد<sup>1</sup>؛ حسینی؛ سید وحید<sup>1</sup>؛عباس نژاد، محدثه<sup>2</sup>؛ محمدیزاده، محمدرضا<sup>1</sup>** <sup>1</sup> آزمایشگاه پژوهشی ابررسانایی و ابرمواد ،دانشکده فیزیك دانشگاه تهران ، انتهاي خیابان کارگر شمالي ، تهران <sup>2</sup> دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان، ایران

چکيده

در پژوهش حاضر، با استفاده از الگوریتم ژنتیک فازهای گوناگونی از جمله Pd4 و Pd4H۶ برای ترکیب هیدرید پالادیوم در فشار صفر پیدا شد که برروی منحنی کانوکسهال قرار دارند. محاسبات فونونی انجام شده برای این ترکیبات نشان میدهد که در نمودار فونونی هیچ بسامد فونونی موهومی وجود ندارد. پس، می توان گفت این ترکیبات در فشارصفر دارای پایداری دینامیکی هستند. محاسبات ابررسانایی برپایه BCS نشان میدهد که برهم کنش الکترون- فونون با افزایش هیدروژن در این ترکیبات زیاد می شود که خود برهانی برافزایش در این ترکیبات در فشار صفر پرامان بایداری آنها است.

واژه های كليدی: الكوريتم ژنتيك ، فشار صفر كلوين ، Pd4H5 ، PdH

Stable structures and phonon properties of PdHx in zero pressure

Arab nusrat abadi, Hamed<sup>1</sup>; Hosseini, S. Vahid<sup>1</sup>; Abbasnejad, Mohaddeseh<sup>2</sup>; Mohmadizade, Mohamad Reza<sup>1</sup>,

<sup>1</sup>Superconductivity Research Laboratory (SLR), Department of Physics, University of Tehran, North Kargar Av., P.O. Box 14395-547, Tehran, Iran <sup>2</sup> Faculty of Physics, Shahid Bahonar University of Kerman, Kerman, Iran

#### Abstract

In the present research, various phases including PdH and  $Pd_4H_5$  compounds were found for the composition of palladium hydride at zero pressure using the genetic algorithm code. The phonon calculations performed for these compounds show that they do not have any imaginary phonon frequency in their phonon diagram, so it can be said that these compounds have dynamical stability at zero pressure. The superconductivity calculations based on BCS demonstrates that the electronphonon interaction rises with increasing hydrogen concentration and in these compounds, which is the proof of the increase in their superconducting temperature.

Keywords. Genetic algorithm, Zero Kelvin pressure, PdH, Pd4H5.

PACS No. 74

ابررسانایی نیست، ولیکن با ترکیب اتم پالادیوم با هیدروژن خاصیت ابررسانایی در این ترکیبات حاصل میشود. دمای گذار ابررسانایی در ترکیب PdH در حدود 9 کلوین گزارش شدهاست [1]. از جمله ویژگیهای این ترکیبات میتوان به ذخیرهسازی بهینه هیدروژن و حسگرهای هیدروژنی

مقدمه

ترکیبهای هیدریدهای پالادیوم از جمله ترکیبات هیدروژن دار بسیار مهمی هستند که خواص شیمیایی و فیزیکی بسیار جالبی از خود نشاندادهاند. همان طور که میدانیم فلز پالادیوم به تنهایی دارای خاصیت

#### روش انجام محاسبات

محاسبات انجام شده توسط دو بسته محاسباتی انجام گرفتهاست: 1-كد USPEX كه اساس كار آن الگوريتم ژنتيك است كه الگوريتم قدرتمند ژنتیک در واقع ساختارهای پایدار را با استفاده از دادههای مادر تصادفی به روشهایی ازجمله تولید مثل (Generation)، ترکیب (Crossover) و جهش (Mutation) و غیره تولید میکند که درصد هرکدام از روشها را می توان در ورودی تعیین کرد. در ادامه، برگزیدهها در هر مرحله، درمراحل بعد دوباره تکرار میشوند تا زمانیکه شرط تابع همگرایی برقرار شود و ساختارهای پایدار تعیین شود که این ساختارهای پیشنهادی الگوریتم ژنتیک خواهند بود [5,6,7]. سپس این ترکیبات در نموداری بنام منحنی کانوکس هال (منحنی آنتالپی برحسب نرخ ترکیب دو اتم هیدروژن وپالاديوم) قرارميگيرند [4]. در اين پژوهش منحني كانوكس هال را با 30 داده مادر كه توسط الگوريتم ايجاد شدند، آغاز كرديم. سپس با انتخاب 20 مرحله بهينه سازي پياپي براي الگوريتم، ساختارها تعيين شدند. محاسبات طبق ورودیهای نرمافزار تا زمان رسیدن به همگرایی دلخواه ادامه میدهد. 2- بسته محاسباتي كوانتوم اسپرسو (Quantum ESPRESSO) كه اساس كار آن نظریه تابعی چگالی است و برپایه امواج تخت و شبه پتانسیل نوشته شده است [6,9]. در این محاسبات از شبه پتانسیل فوق نرم برای توصیف اندركنش الكترونها با يونها انتخاب شدهاست. براي توصيف انرژي تبادلي همبستگی از رهیافت (Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE و تقریب شیب تعميميافته (GGA) استفاده شده است. مش بندى شبكه وارون بهصورت 4×4×4 در نظر گرفته شدهاست. در ادامه، انرژی قطع تابع موج برای

ساختارها Ry 50 انتخاب شد تا همگرایی مناسب نیرو<sup>(4-1</sup>0) بهدست آید. محاسبات برهمکنش الکترون - فونون با رهیافت نظریه تابعی چگالی اختلالی انجام شد که از طریق آن می توان ماتریس های الکترون- فونون را محاسبه کرد. برای انجام محاسبات فونونی نیز مشبندی شبکه وارون به صورت 4×4×4 در نظرگرفته شده است. از محاسبه ماتریس های الکترون-فونون، ثابت جفت شدگی الکترون- فونون λ محاسبه می شود. سپس، با داشتن ثابت λ و پتانسیل الکترون- الکترون 10.1 μ که بدون بعد است [10]، قادریم با فرمول نیمه تجربی آلن-دنیس دمای گذار ابررسانایی را برای ترکیبات موردنظر پیش بینی کنیم [1].

## شرح نتايج و بحث

نتایج ترکیب PdH<sub>X</sub> در فشار صفر در شکل 1 و 2 نشان داده شده است. شکل 1 نمودار کانوکس هال ساختار پیش بینی شده در دما و فشار صفر است. همان طور که در شکل 1 مشخص است ساختار پیش بینی شده روی منحنی کانوکس هال ترکیب PdH است که پس از بهینه سازی های متوالی به-دست آمده است.



همان طور که دیده می شود، نقاطی که در بالای نمودار کانوکس هال به دست آمده است، دارای کمترین مقدار انرژی نیستند، پس الگوریتم ژنتیک آن ها را در نتایج نهایی در نظر نگرفته است. تمامی نقاط در بازه انرژی وحدهای حالت های گازی و فلزی اتم های H<sub>2</sub> و Pd هستند. ساختارهای زیر منحنی به دلیل نبودن در محدوده انرژی آزاد با استوکیومتری پایدار به صورت خودکار از محاسبات کنار گذاشته شده اند. نقاط روی منحنی در حالت شبه پایدار هستند، که در قسمت بعد به پایداری آن ها پرداخته می شود. قابل ذکر است نقاط قرمز رنگ را داده های اولیه یا مادر می گویند و نقاط سبز رنگ

هم ساختارهایی هستند که پس از چند مرحله بهینه سازی ایجاد شده اند، و تعداد کل ساختارهای ایجاد شده در منحنی در حدود 400 می باشد که با فرض 20 مرحله تولید و 20 ساختار جدید ایجاد می شود. در ادامه، با حفظ شروط قبلی، یعنی فشار و دمای صفر، با تغییر دیگرشرایط ورودی از جمله تغییر در مقدار بیشینه و کمینه تعداد اتمها در سلول واحد و تغییرات در ورودیهای دیگر، منحنی کانوکسهال برای ترکیب PdH رسم شد. همان طور که در شکل شماره 2 دیده می شود، این منحنی نیز همانند منحنی کانوکسهال در شکل 1 دارای شکستگی رو به بالا یعنی با شیب منفی نمی باشد و دادههای پایین منحنی قابل قبول نیستند [4]. دو اتم هیدروژن و پالادیوم در حالت آزاد دارای بیشترین انرژی هستند و ساختارهای دیگر دارای انرژی کمتری بوده وساختارهای بالای منحنی در حالت ناپایدار هستند[4,7]. ساختار جدید می اس که باید به مانند ترکیب PdH پایداری آن منحنی کانوکس هال ظاهر شده است که باید به مانند ترکیب PdH پایداری آن را بررسی کرد که در ادامه به آن پرداخته شده است [8].



شكل 2:نمودار آنتالپي برحسب نسبت تركيب پالاديوم وهيدورژن در فشار 0GPa با 20 مرحله توليد

برای اثبات پایداری ترکیب PdH، مدهای فرکانسی اپتیکی و آکوستیکی در فاز مکعبی رسم شدند که در کار قبل [10] به آن پرداخته شد. همان طور که بیان شد هیچ شاخه فونونی موه ومی در منحنی پاشندگی فونونی این ترکیب وجود ندارد که به معنای پایداری دینامیکی ساختار PdH است. همچنین باید ذکر کرد که این ترکیب ابتدا به ساکن ناپایدار شد که با اضافه کردن اثرات نسبیتی به آن ناشی از جرم سنگین فلز پالادیوم و برهمکنش های اسپین- مدار به محاسبات، ساختار مورد نظر پایدار شد که نشان از اهمیت این محاسبات است. همچنین در نمودار فونونی آن دیده شد که تمامی مدهای عرضی و طولی آن از هم تفکیک شدهاند [9].

همان طور که در شکل 3 مشخص است، ترکیب Pd₄H₅ نیز همانند ترکیب PdH [10] هیچگونه بسامد موهومی در نمودار پاشندگی فونونی از خود نشان نمیدهد که گواهی بر پایداری دینامیکی این ترکیب است. ترکیب مورد نظردارای 9 اتم (4 اتم Pd و 5 اتم H) در سلول واحد می باشد. یس دارای 27 مد عرضی و طولی است ومشاهده می شود، مدها به طرز قابل قبولی مسطح شدهاند، پس احتمال افزایش چگالی فونونی در ساختار زیاد است و مي تواند برهمكنش هاي الكترون- فونون را افزايش دهد زيرا فونونهای بیشتری برای شرکت در جفت شدگی کو پر می توانند در درسترس باشند. مدهای ایتیکی در نقط ه گاما (۲) تقریباً غیرتبهگن هستند زیرا برهمکنش اسپین-مدار می تواند تاحدودی این تبهگنی در نقطه T را بردارد. در ناحیه های X-Y و ناحیه Z-R مدها تقریبا مسطح شدهاند که به خاطر طول زیاد شبکه وارون در این جهتها است که امواج فونونی را در این نواحی تخت می کند. در نمودار چگالی حالتها در سمت راست نمودار دیده می شود که اتم فلز پالادیوم به دلیل سنگین بودن فرکانس های آن در نواحی پایین منحنی فرکانسی قرار میگیرد و فرکانس های اتم هیـدروژن در نواحي بالاتر قرار دارند، و به طور مشهودي سهمهاي دو اتم از هم تفكيك شدەاند.



شكل 3:نمودار فركانس فونوني و چگالي حالتهاي تركيب Pd<sub>4</sub>H<sub>5</sub>.

در شکل4 نمودار ساختار نواری ترکیب Pd4H5 مشاهده می شود. همان طور که از شکل پیداست نوارهای الکترونی انرژی فرمی را قطع نمودهاند که نشان از خاصیت فلزی این ماده می باشد. نوارهای رسانش در این ترکیب با شیب نسبتاً تندی تراز فرمی را قطع می کنند که نشان از سرعت بالای الکترون های فرمی در این ساختار است. همان طور که واضح است ترازهای 4d اتمهای پالادیوم بیشترین سهم را در خواص الکترونی این ساختار بازی میکند، درحالی که 4p در انرژیهای پایینتر تراز فرمی می توانند یافت شوند. اما اتم هیدروژن با وجود اثر بسیار کمی که در تراز



فرمی دارد، در انرژی های اطراف انرژی فرمی پهن شده است. احتمالا اتم های پالادیوم هستند که در خواص ابررسانایی این ترکیب نقش بسزایی دارند، زیرا الکترون های پیوندی جفت کوپر از طرف اتم های پالادیوم می تواند بیشتر باشد.



همچنین محاسبات ابررسانایی برپایه BCS با استفاده از رهیافت تابعی چگالی اختلالی نشان داد که دمای ابررسانایی ترکیب Pd<sub>4</sub>H<sub>5</sub> در حدود 6K است که در مقایسه با پژوهش قبل ما [10] که بر روی Pd<sub>2</sub>H و Pd<sub>4</sub>H انجام شد دمایگذار ابررسانایی درحدود K 0.3 بدستآمد[10]، پس نشان میدهد که افزایش درصد اتم هیدروژن نسبت به اتم پالادیوم میتواند در افزایش دمایگذار ابررسانایی تاثیرگذار باشد. با این حال دمای گذار ابررسانایی هنوز پایین گزارش شدهاست و این میتواند به دلیل جفت شدگی ضعیف الکترون- فونون در این ساختار باشد. با این حال امید است که با یافتن ترکیباتی مشابه در فشار بالاتر بتوان دمایگذار ابررسانایی را در ترکیباتی بر پایه PdH افزایش داد.

نتيجه گيري

در پژوهش حاضر با استفاده از بسته محاسباتی USPEX که برپایه الگوریتم ژنتیک و زبان پایتون نوشته شدهاست، وهمچنین بسته محاسباتی Quantum ESPRESSO اقدام به یافتن ترکیب های جدید PdHX در فشار OGPa نمودیم. محاسبات دو ترکیب متفاوت به صورت Pd4 و Pd4H5 را پیشنهاد داد. محاسبات فونونی نیز نشان میدهد که ترکیبهای یافتشده بااستفاده از الگوریتم ژنتیک پایدار هستند. محاسبات ابررسانایی اصول اولیه بر پایه BCS نشان داد که ترکیبهای یافتشده دارای دمای گذار ابررسانایی نسبتا پایینی هستند که نشان از بر همکنش ضعیف الکترون-فونون در این ساختارها است. ولی با این حال دیده می شود که با افزایش اتم

هیدروژن در ترکیب احتمال بالا رفتن دمای ابررسانایی وجود دارد. بنابراین تلاش برای یافتن ترکیبهایی بر پایه اتمهای پالادیوم و هیدرژن در فشارهای بالاتر ادامه دارد تا بتوان دمای گذار ابررسانایی را در ترکیبات هیدریدهای پالادیم افزایش داد.

[1] Tripodi, P ,etal ,Possibility of high temperature superconducting phases in PdH. Physica C: Superconductivity, 388, 571-572. (2003)

[2]Kowalska, E., Influence of PdHx formation ability on hydrogen sensing properties of palladium-carbonaceous films. Sensors and Actuators A: Physical, 203, 434-440. (2013)[3]Manchester, F. D., etal., The H-Pd (hydrogen palladium) system. Journal of phase equilibria, 15(1), 62-83. (1994)

[4] Anelli, A., etal. Generalized convex hull construction for materials discovery. Physical Review Materials, 2(10), 103804.
(2018)

[5] Mitchell, M., An introduction to genetic algorithms. MIT press. (1998)

[6]*Glass, C. W.,etal .USPEX—Evolutionary crystal structure prediction. Computer physics communications, 175*(11-12), 713-720.(2006)

[7] Oganov, A. R., etal, Crystal structure prediction using ab initio evolutionary techniques: Principles and applications. The Journal of chemical, physics, 124(24), 244704. (2006)

[8]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)

[9] Setayandeh, S. S., etal . Electron and phonon band structures of palladium and palladium hydride: a review. Progress in Solid State Chemistry, 60, 100285. (2020)

[10]عرب ،حامد . حسینی ، سید وحید . همکاران ، ترکیبات پایدار وخواص فونونی ترکیب هیدرید پالادیوم با استفاده از داده کاوی ، کنفرانس ملی ابررسانایی دانشگاه صنعتی اصفهان ، NSAS. 1401 تابستان



## خواص الکترونی نانو نوارهای سیلیسن لبه دسته مبلی ناقص شده با پادنقطههای کوانتومی خطی کلامی ، رضا ؛ کتابی ، سید احمد دانشکاه فیزیک دانشگاه دامغان، ایران

#### چکيده

در این مقاله، خواص الکترونی نانو نوارهای سیلیسن لبه دسته مبلی ناقص شده با پادنقطههای کوانتومی خطی بررسی می شود. نانو نوارهای سیلیسن خالص دارای N=5 اتم سیلیکون در عرض می باشند. پادنقطه کوانتومی خطی بصورت حلف زنجیره اتمی در طول نانو نوار ایجاد می شود. با ایجاد پادنقطههای خطی، محدودیت-های کوانتومی جدیدی در آرایش الکترونی نانو نوار به وجود می آید، در نتیجه خواص الکترونی و ترابردی نانو نوارها نظیر ساختار نواری، چگالی حالتهای الکترونی و طیف گسیل الکترونی در حضور این پادنقطهها کاملاً تغییر می کند. محاسبات با استفاده از تقریب تنگ بست به همراه فرمولبندی تابع گرین غیرتعادلی انجام می گیرد.

واژه های کلیدی: سیلیسن، پادنقطه کوانتومی خطی، طیف گسیل الکترونی

## Electronic properties of armchair silicene nanoribbons defected by linear quantum antidots

#### Kalami, Reza; Ketabi, Seyed Ahmad

School of Physics, Damghan University, Damghan, Iran

#### Abstract

In this paper, the electronic properties of armchair Silicene nanoribbons defected by linear quantum antidots is studied. The pristine Silicene nanoribbon considered is modelled with N=5 silicon atoms on the width. The linear quantum antidot is created as the removing of the atomic chain along the nanoribbon. It can be realized that the quantum confinement of nanoribbons is quite changed by the presence of linear quantum antidos. This quantum confinement results in novel electronic and transport properties like band structure, density of states and electronic transmission spectra.

*Keywords:* Silicene, Linear quantum antidot, electronic transmission spectra PACS No. 72

سیلیسن یک ماده دو بعدی جدید است که توجه محققان بسیاری را به سبب خواص الکترونی منحصر به فردش به خود جلب کرده است. در ساختار سیلیسن، اتمهای سیلیکون در دو زیرشبکه به فاصله عمودی Å0.46 نسبت به هم قرار گرفتهاند[7]. برخی از مطالعات وجود دارند که اثر ایجاد پادنقطه کوانتومی بر روی خواص الکترونی و ترابردی نانو نوارهای سیلیسن را نشان می-دهد[۳و۴]. ایجاد پادنقطه کوانتومی خطی در نانو نوار سیلیسن لبه زیگزاگ، تغییراتی را در خواص الکترونی و ترابردی این نوع نانو نوارها ایجاد میکند. به طوری که وقتی پادنقطه کوانتومی خطی در وسط نانو نوار سیلیسن لبه زیگزاگ ایجاد شود، خواص الکترونی

مقدمه

امروزه یکی ار مهمترین مقوله ها برای بهبود عملکرد قطعات دوبعدی، مهندسی گاف نواری می باشد. تغییر یک ماده ار فلز به نیمرسانا می تواند یک موفقیت تلقی شود، زیرا با این کار جریان در ماده مورد مطالعه تحت کنترل قرار می گیرد [۱]. می توان برای افزایش گاف نواری و یا تبدیل ماده از فلز به نیمرسانا و با توجه به نوع ساختار مورد نظر فرایندهایی نظیر افزودن ناخالصی به ماده، اعمال میدان الکتریکی یا مغناطیسی خارجی و ایجاد پادنقطه های کوانتومی را مورد توجه قرار داد.



از قبیل ساختار نواری تغییر کرده و در نتیجه خواص ترابردی مانند رسانندگی به طور قابل ملاحظهای افزایش مییابد[<sup>4</sup>]. در مطالعه حاضر نانو نوارهای سیلیسن خالص لبه دسته مبلی با عرض N=5اتم سیلیکون که گاف نواری حدود صفر و رفتاری فلزی دارد، با پادنقطههای کوانتومی خطی ناقص میشوند. شکل ۱ (الف) نانو نوار سیلسن لبه دسته مبلی خالص با عرض N=5 اتم که به دو الکترود از جنس خودش متصل است را نشان میدهد که در آن یک (ب) نانو نوار سیلسن لبه دسته مبلی را نشان میدهد که در آن یک پادنقط و کوانتومی خطی در عرض N=1 در ناحیه مرکزی و نوار را به صورتی نشان میدهد که پادنقط و کوانتومی خطی در نوار را به صورتی نشان میدهد که پادنقط و کوانتومی خطی در عرض N=2 و N=2 در آنها ایجاد شده است.



شکل۱ : (الف) طرحی از یک نانو نوار سیلیسن لبه دسته مبلی ساده و نانو نوار سیلیسن ناقص شده با پادنقطه خطی واقع در عرض (ب) N=1 (ج) N=2 (د)N=3

#### مدل و روش محاسبه

در این بخش با استفاده از رهیافت تابع گرین غیر تعادلی و تقریب تنگ بست، مدل محاسباتی و فرمولبندی مورد نظر ارائه میشود. ماتریس هامیلتونی نانو نوار سیلیسن با استفاده از تقریب تنگ بست به صورت زیر نوشته میشود:

$$H = \epsilon_{0} \sum_{i} c_{i\alpha}^{\dagger} c_{i\alpha} + t \sum_{\langle i,j \rangle \alpha} (c_{i\alpha}^{\dagger} c_{j\alpha}) + i \frac{\lambda_{so}}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle \langle i,j \rangle \rangle \alpha\beta} v_{ij} c_{i\alpha}^{\dagger} \sigma_{\alpha\beta}^{z} c_{j\beta} - i \frac{2}{3} \lambda_{Ra} \sum_{\langle \langle i,j \rangle \rangle \alpha\beta} \mu_{ij} c_{i\alpha}^{\dagger} (\vec{\sigma} \times \vec{d}_{ij}^{0})_{\alpha\beta}^{z} c_{j\beta}$$

$$(1)$$

$$\begin{aligned} H_{C\gamma} &= t \sum_{\langle i,j \rangle \alpha} (c_{i\alpha}^{\dagger} c_{j\alpha}) \\ &+ i \frac{\lambda_{so}}{3\sqrt{3}} \sum_{\ll i,j \gg \alpha\beta} v_{ij} c_{i\alpha}^{\dagger} \sigma_{\alpha\beta}^{z} c_{j\beta} \\ &- i \frac{2}{3} \lambda_{Ra} \sum_{\ll i,j \gg \alpha\beta} \mu_{ij} c_{i\alpha}^{\dagger} (\vec{\sigma} \times \overrightarrow{d_{ij}})_{\alpha\beta}^{z} c_{j\beta} \\ &\geq \gamma = L, R \quad \text{(Y)} \end{aligned}$$

چگالی حالتهای الکترونی به صورت زیر نوشته می شود:
$$DOS(E) = -\frac{1}{\pi} Im\{Tr[G^r]\}$$

همچنین طیف گسیل الکترونی با رابطه زیر احتمال گذار وابسته به انرژی الکترونی با انرژی E میباشد. (۴)

$$T(E) = \operatorname{Re}\{Tr[\Gamma_L, G^r, \Gamma_R, (G^r)^{\dagger}]\}$$
<sup>(\*)</sup>

$$G^{r}(E) = G^{r}(E) = I_{L(R)}(E) = I_{L(R)}(E)$$

$$She chi in the second secon$$

 $g_{L(R)}^{r}(E) = \left[ (E + i\eta)I - H_{L(R)} \right]^{-1} \tag{A}$ 

#### نتايج و بحث

یک نانو نوار سیلیسن لبه دسته مبلی با عرض 2+N=3p که در آن p یک عدد صحیح می باشد، گاف نواری تقریباً صفر دارد و رفتار فلزی از خود نشان می دهد. در این مطالعه 1=p و در نتیجه N=5 در نظر گرفته شده است. در بخش اول می خواهیم ببینیم با ایجاد پادنقطه کوانتومی خطی می توان رفتار فلزی گونه این نوع نانو نوار را به نیمرسانا تبدیل کرد یا خیر. ابتدا ساختار نواری و تغییرات گاف نواری نانو نوارهای سیلسن لبه دسته مبلی ساده و نانو نوارهای سیلسن لبه دسته مبلی مادومی خطی در عرضهای مختلف باهم مقایسه می شوند.

شکل ۲ (الف) ساختار نواری نانو نوار سیلیسن ساده لبه دسته مبلی با عرض N=5 را نشان می دهد که در آن گاف نواری حدود صفر میباشد و بیان کننده آن است که این نوع نانو نوارها رفتار فلزی از خود بروز می دهند. با ایجاد پادنقطه های کوانتومی خطی در عرض-های N=1,2,3 در نانو نوار سیلیسن لبه دسته مبلی با عرض N=1,2,3 های N=1,2,3 در نانو نوار سیلیسن لبه دسته مبلی با عرض N=5 ساختار نواری دستخوش تغییراتی می شود. همانطور که در شکل ۲ (ب) نشان داده شده است، حضور پادنقطه کوانتومی خطی در عرض N=1 باعیث ایجاد گاف نیواری حدود V=1,23 eV نواری حدود N=1 باعیث ایجاد گاف نواری حدود نواری حدود V=1 در ساختار نواری خواهد شد و نوارهای انرژی در عرض N=2 در ساختار نواری خواهد شد و نوارهای انرژی (ج) قابل مشاهده است، گاف نواری حدود N=1.33 eV در نانو نوار ایجاد شود، همانطور که در شکل (ج) قابل مشاهده است، گاف نواری حدود شکل ۲ (د) ساختار نواری

نانو سیلیسن ناقص شده با پادنقط کوانتمی در عرض N=3 را نشان میدهد. همانطور که در شکل مشخص است با ایجاد این نوع پادنقطه کوانتومی خطی، هیچ تغییر محسوسی در گاف نواری نسبت به نانو نوار سیلسن ساده مشاهده نمی شود و فقط نوارهای انرژی در این نوع نانو نوارها کاهش یافته است. به نظر میرسد ایجاد پادنقطه کوانتومی در عرض N=3 باعث نخواهد شد که تغییرات محسوسی در ساختار نواری نانو نوار به وجود آید چون ایجاد این نوع پادنقطه کوانتومی خطی در عرض میانی نانو نوار بوده و تقارن شکل نانو نوار را حفظ میکند. پس ایجاد پادنقطه کوانتومی خطی در عرضهای N=1,2 و نزدیک به لبه نانو نوار رفتار ماده را از فلزی به نیمرسانا تغییر میدهد ولی وقتی پادنقطه کوانتومی خطی در Sel ایجاد شود، رفتار ماده فلزی باقی خواهد



شکل ۲: (الف) ساختار نواری نانو نوار سیلیسن لبه دسته مبلی ساده و نانو نوار سیلیسن لبه دسته مبلی ناقص شده با پادنقطه خطی واقع در عرض (ب) N=1 (ج)N=2 (د) N=3

در هماهنگی با ساختار نواری نانو نوارهای ساده و ناقص شده شکل ۲، چگالی حالتهای الکترونی این ساختارها برای نانو نوار سیلیسن لبه دسته مبلی ساده و ناقص شده با پادنقطههای کوانتومی خطی بترتیب در نمودارهای (الف)، (ب)، (ج) و (د) شکل ۳ نشان داده شده است. چنانکه ملاحظه میشود در نمودارهای (ب) و (ج) گافهای نواری طبق پیش بینی ساختار نواری شکل ۲ وجود داشته



و در نمودارهای (الف) و (د) گاف نواری وجود ندارد و حالت-های الکترونی فعال و قابل ملاحظهای در تراز فرمی سیستم وجود دارد.



شکل ۳: (الف) چگالی حالتهای الکترونی نانو نوار سیلیسن لبه دسته مبلی ساده و نانو نوار سیلیسن لبه دسته مبلی ناقص شده با پادنقطه خطی واقع در عرض (ب) N=1 (ج) N=3 (د) N=2



شکل ۴: (الف) طیفهای گسیل الکترونی نانو نوار سیلیسن لبه دسته مبلی ساده و نانو نوار سیلیسن لبه دسته مبلی ناقص شده با پادنقطه خطی واقع در عرض (ب) N=1 (ج) N=3 (د) N=2

نمودارهای (الف) تا (د) در شکل ۴ طیف گسیل الکترونی از طریق سامانه را بترتیب در نانو نوارهای ساده و ناقص شده با پادنقطههای کوانتومی خطی نشان میدهد. چنانکه ملاحظه میشود طیفها حول انرژی فرمی (E=0) متقارن بوده و در هماهنگی با ساختارهای نواری مربوطه در شکل ۲ چگونگی ترابرد الکترون از طریق نانو نوارها را نشان میدهند.

#### نتيجه گيرى

در این مقاله خواص الکترونی نانو نوارهای سیلیسن لبه دسته مبلی با عرض N=5 ساده و ناقص شده با یادنقطه کوانتومی خطی در عرض های N=1,2,3 مورد بررسی قرار گرفت. نشان داده شد که ساختار نواری نانو نوارهای سیلسن با ایجاد پادنقطه کوانتومی خطی تغییر میکند. گاف نواری دستخوش تغییر میشود که مقدار این گاف به تقارن نقص های ایجاد شده وابسته است. به طوری که در حضور پادنقطه کوانتومی خطی در عرضهای N=1,2 که تقارن نانو نوار را تغییر میدهد، گاف نواری قابل توجهی در سامانه ايجاد مي شود ولي وقتى اين يادنقطه كوانتومي خطي در عرض N=3 ایجاد شود که تقارن سامانه را حفظ میکند کماکان گاف نواری در حدود صفر باقی میماند. به علت تغییر در ساختار نواری و گاف نواری در حضور پادنقطه کونتومی خطی در عرض های مختلف، خواص دیگر سامانه نظیر چگالی حالتهای الکترونی و طيفهای گسيل الکترونی نيز دستخوش تغيير می شود، به طوری که طیف گسیل الکترونی در اطراف انرژی فرمی در حضور یادنقطه کوانتومی خطی در عرض های N=1,2 به طور قابل ملاخظهای کاهش می یابد ولی در حضور یادنقطه کوانتومی خطی در عرض N=3 مقدار كمي افزايش دارد.

[1] N. Taheri, M. Moradi & M. H. Farzad, "Structural, electronic and magnetic properties of some adatoms adsorbed at the edges and Mg-doped SiC nanoribbons" *Computational Condensed Matter*, **32** (2022) e00722.

[2] F. Bechstedt, P. Gori, O. Pulci, "Beyond graphene: Clean, hydrogenated and halogenated silicene, germanene, stanene, and plumbene" *Prog. Surf. Sci.* **96** (2021) 100615.

[<sup>r</sup>] B. Shojaeverdi, E. Zaminpayma, "Influence of vacancy cluster on the electronic transport properties of silicene sheet" *Phys. E.* **121** (2020) 114109.

[\*] F. Wan, X. Wang, Y. Guo, J. Zhang, Z. Wen, Y. Li, " Role of line defect in the bandgap and transport properties of silicene nanoribbons" *Phys. Rev. B.* **104** (2021) 195413.

مرجعها



جعفری فشارکی، مرجانه (\* ؛ احمدوند، حسین ۲

<sup>ا</sup>دانشکده فیزیک، دانشگاه پیام نور، تهران ۲ دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

#### چکیدہ

در این پژوهش سرامیک چندفرونی XRD3]/xCaZrO3/یرCaZrO3) برای مقادیر مختلف (x=(0.0-0.8) به روش حالت جامد ساخته شد. ساختار و فاز نمونهها توسط الگوی پراش اشعهٔ ایکس (XRD) بررسی و مقایسه شد. بررسی ریز ساختاری نمونهها نیز توسط میکروسکوپ الکترونی روبشی-گسیل میدانی (FE-SEM) انجام شد. وابستگی دمایی ثابت دیالکتریک (٤٢) به منظور مطالعه گذارهای فروالکتریکی ماده مورد بررسی قرار گرفت. همچنین حلقه پسماند فروالکتریک نمونههای ساخته شده اندازه گیری و مقایسه شد. اندازه گیری مشخصههای فروالکتریکی حاکی از آن است که وارد شدن CaZrO3 به میزبان PFN-PT موجب بهبود خواص فروالکتریکی و شکل گیری مرز فاز مورفوتروپیک (MPB) است. بیشینه ثابت دیالکتریک و قطبش باقی مانده برای نمونه x=۰۰۶ به دست آمد.

واژه های کلیدی: سرامیک،خواص ساختاری، فروالکتریک.

# Investigation of Structural and Ferroelectric Properties of (1-x)[PbFe<sub>0.5</sub>Nb<sub>0.5</sub>O<sub>3</sub>-PbTiO<sub>3</sub>]/xCaZrO<sub>3</sub> Ceramic

Jafari Fesharaki, Marjaneh<sup>1\*</sup>; Ahmadvand, Hossein<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Payame Noor University, Tehran <sup>2</sup> Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan

#### Abstract

In this study, multiferroic ceramic of  $(1-x)[PbFe_{0.5}Nb_{0.5}O_3-PbTiO_3]/xCaZrO_3$  for different values of x=0.0-0.08 was prepared by solid-state reaction method. The structure and phase formation of samples were analyzed and by x-ray diffraction (XRD). The microstructural analysis of the samples was investigated using field emission-scanning electron microscopy (FE-SEM). The temperature dependence of the dielectric constant ( $\varepsilon$ r) was investigated to study the ferroelectric phase transitions of the compound. Also, the ferroelectric hysteresis loop of the samples was investigated. The measurement of ferroelectric characteristics indicates that the presence of CaZrO3 in the PFN-PT host improves the ferroelectric properties which is due to formation of morphotropic phase boundary (MPB). The maximum dielectric constant and remanent polarization was obtained for the sample with x = 0.04.

*Keywords:* Structural Properties, Ferroelectric, CaZrO<sub>3</sub>, PFN-PT. PACS No. 70, 77.

ذخیرهسازی اطلاعات دارند، به شدت توجه پژوهشگران را به خود جلب کردهاند. در این میان چندفروئیهایی که به طور همزمان هر دو فاز فرومغناطیس/آنتیفرومغناطیس و فروالکتریک/فروالاستیک را داشته باشند هرچند نسبتاً کمیاب هستند ولی از اهمیت بیشتری

در دهه های گذشته تاکنون، اکسیدهای چندفروئی با ساختار پروسکایت به دلیل مفاهیم فیزیکی جذاب نظیر جفتشدگی مگنتوالکتریک و کاربردهای فناورانه بالقوهای که در حافظه ها و

مقدمه



بالا. جهت تهيهٔ ١٥g از مادهٔ PFN-PT، با توزين مواد بر اساس استوکیومتری مشخص، درصدهای وزنی مشخصی از این مواد به مدت ٤٥ دقيقه درون هاون دستي مخلوط شدند. سپس تركيب حاصل در مراحل مختلف تحت عمليات حرارتي در كورهٔ الکتریکی با قابلیت برنامهریزی قرار گرفت. در نهایت فاز فروالکتریک ترکیب PFN-PT در دمای C° ۱۱۰۰ تشکیل شد. زيركنات كلسيم (CZO) نيز با استفاده از روش سل-ژل خوداحتراقي با سوخت اسيد سيتريك [٧] به طور جداگانه تهيه شد. جهت تهیهٔ سرامیک PFN-PT/xCZO)، بر اساس مقادیر مختلف x درصدهای وزنی مختلفی از CZO و PFN-PT به مدت ۲٤ h همراه با اتانول به وسیله آسیاب گلولهای همراه با گلولههایی از جنس زیرکونیوم آسیاب شد. پس از اتمام زمان آسیاب کاری، پودر حاصل درون آون خشک شد. در نهایت قرص هایی به جرم ۲۶/۰، قطر ۸mm و ضخامت ۱mm در دستگاه پرس تهیه شد و به مدت h در دمای °C در دمای ۳h تحت شار اتمسفر بازیخت شد تا برای اندازهگیریهای فروالکتریک مورد استفاده قرار گیرند. بررسی ساختاری و تشکیل فاز نمونهها توسط الگوی پراش اشعهٔ ایکس (XRD) با پرتو Cu-Ka انجام شد. بررسی ریزساختاری نمونهها توسط میکروسکوپ الکترونی روبشی-گسیل میدانی (FE-SEM) انجام شد. وابستگی دمایی ثابت دی الکتریک با دستگاه LCR متر انجام شد. منحنی قطبش بر حسب میدان الکتریکی (P-E) در دمای اتاق، بر مبنای مدار Sawyer-Tower انجام شد.

#### بحث و نتايج

شکل(a) ۱ الگوی XRD همه نمونه ها را برای مقادیر مختلف X نشان می دهد. تمامی نمونه ها ساختار بلوری پروسکایت را بدون هیچگونه فاز اضافی (ناخالصی) نشان می دهند. شکافتگی پیک پراش اصلی (۱۱۰) حول °۳۲-۴۵ مطابق شکل(d) ۱ برای نمونه . \*\* دلالت بر تقارن رومبو هدرال دارد که مشخصه گذار رومبو هدرال-شبه مکعبی در مرز فاز مورفو تروفیک'(MPB) می-باشد. با افزوده شدن CZO به میزبان PFN-PT، برای نمونه باشد. در حقیقت

morphotropic phase boundary (MPB)<sup>1</sup>

برخوردارند. PbFe<sub>0.5</sub>Nb<sub>0.5</sub>O3 یا به اختصار PFN متعلق به خانوادهای از ترکیبات پروسکایت با پایه سرب با فرمول عمومی Pb(B1B2)O3 مىباشد كە در أن B1 كاتيونى با ظرفيت پائين نظير: Sc<sup>3+</sup>, Fe<sup>3+</sup> ،Mg<sup>2+</sup>, Zn<sup>2+</sup> و غیرہ و B<sub>2</sub> کاتیونی با ظرفیت بالاتر نظیر: +Nb<sup>5+</sup>, Ta<sup>5+</sup> و غیره می باشد. PFN یکی از ترکیبات تک فاز است که ماهیت گذار فازی آن حد واصل فروالکتریکهای معمولی و فروالکتریکهای واهلیده است و از این رو گذار فاز پراکنده نامیده می شود و به دلیل داشتن ثابت دی الکتریک بالا، گذار فازی پراکنده و دمای پخت پائین (در مقایسه با دیگر سرامیکهای تجاری نظیر BaTiO<sub>3</sub> ،BaTiO<sub>3</sub> و CaTiO<sub>3</sub>) مادهای جذاب برای خازن های سرامیکی می باشد [۱]. به منظور بهینه کردن خواص فروالکتریکی و پیزوالکتریکی PFN، محلول جامدی از ترکیبات مختلف: Pb(Ni<sub>1/3</sub>Nb<sub>1/3</sub>)O<sub>3</sub> ،PbTiO<sub>3</sub> و Pb(Ni<sub>1/3</sub>Nb<sub>1/3</sub>)O<sub>3</sub> ،PbTiO<sub>3</sub> بررسی شدهاند. PbFe<sub>0.5</sub>Nb<sub>0.5</sub>O<sub>3</sub>-xPbTiO<sub>3</sub>) یا به اختصار PFN-PT بسته به مقدار x میتواند ساختارهای بلوری رومبوهدرال، شبه مكعبى و تتراگونال داشته باشد. اما بیشینه خاصیت فروالکتریکی مربوط به x=۰/۳ می باشد، که نشان دهنده شکل گیری مرز فاز مورفوتروپیک (MPB) است. مرز فاز مورفوتروييك حـد واسـط دو سـاختار بلـوري فروالكتريـك و غير فروالکتريک است کے در آن خواص فروالکتريکے و پیزوالکتریکی بهبود شدیدی دارند. با جانشانی اکسیدهای پروسےکایت متداولی نظیر (CZO) CaZrO بے خاصیت فروالكتريكي بالا در تركيب PFN-PT، مي توان خواص ساختاري و فروالکتریکی این سرامیک را بهبود بخشید [۲-۲]. انتظار میرود وارد شدن مقدار مشخصی CZO به میزبان PFN-PT بتواند موجب تغيير فاز دىالكتريك يراكنده به سمت دىالكتريك واهليده شود. بر همین مبنا در این پژوهش، با وارد کردن مقادیر مختلفی از CZO به میزبان PFN-PT، خواص ساختاری و فروالکتریکی محلول جامد PFN-PT/xCZO) با هدف تعیین مقدار بهینه CZO مورد بررسی قرار گرفته است.

#### روش آزمایش

مواد اولیه به کار گرفته شده جهت تهیهٔ PFN-PT به روش حالت جامد عبارتند از: PbO، Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>، PbO و TiO با خلوص ثانیگان بیکیپیک

> با وارد شدن CZO به شبکه PFN-PT و تشکیل محلول جامد سهتایی 0.98(PFN-PT)/0.02CZO ساختار بلوری از رومبوهدرال به شبه مکعبی تغییر میکند. مطابق شکل(b) ۱، افزودن مقادیر بیشتر CZO به میزبان PFN-PT، (۲۰/۰۰<x) هیچ تغییری در ساختا بلوری ایجاد نمیکند. بررسی ریزساختاری نمونهها در شکل ۲ نشان داده شده است. همان طور که در شکل ۲ مشاهده می-شود اندازه ذرات یکنواخت نمیباشد و توزیع گستردهای از اندازه ذرات مشهود است. وجود حفرهها در شکل دلالت بر ضروری بودن افزایش دمای بازپخت با افزایش مقدار CZO به شبکه میزبان دارد.



سکل ۲۰ الکوی ARD سرامیک ۲۰۹۳ ۲۰۸۵ ارمدا) برای وابستگی دمایی ثابت دیالکتریک (ε<sub>r</sub>) و تابع اتلاف (tanδ) برای بسامد MHZ به ترتیب در شکل(a) ۳ و شکل(b) ۳ نشان داده شده است. به طور کلی خاصیت دیالکتریک مفهوم بسیار پیچیده-ای است. از آنجا که پارامترهای مختلفی نظیر اندازه ذره، سوئیچینگ دیواره حوزه و پیکربندی فازهای ثانویه می تواند در آن تأثیر زیادی داشته باشد. به منظور بررسی ثابت دیالکتریک به طور دقیق باید تأثیر همه عوامل ذکر شده در نظر گرفته شود.



شکل ۲. تصاویر SEM نمونههای ۵.04CZO (a شکل ۲. تصاویر ۵.96(PFN-PT) 0.92(PFN-PT)/0.08CZO (b

از سوی دیگر ثابت دیالکتریک سرامیکهایی بر پایه PFN-PT بسته به شرایط تهیه بسیار متغیر است [٨]. مطابق شکل (a) ۳، ثابت دیالکتریک برای نمونه ۲=۰ تا x=۰/۰٤ روند افزایشی دارد، اما پس از آن برای نمونههای X=۰/۰٦ و X=۰/۰۶ روند کاهشی دارد. وجود بیشینه ثابت دیالکتریک برای X=۰/۰٤ می تواند به دلیل شکل گیری ناحیه MPB در اثر CZO باشد. زیرا معمولاً قله ثابت دىالكتريك در نواحي MPB ايجاد مى شود [۹]. از طرفى با توجه به مقادیر تابع اتلاف مطابق شکل(b) ۳، نمونهها رسانندگی نسبتاً بالایی نشان میدهند و نمی توان به طور کامل سهم عوامل بیرونی را در ثابت دیالکتریک نادیده گرفت. همچنین کاهش ثابت دی-الکتریک از نمونه x=۰/۰٤ تا x=۰/۰۴ ناشی از انحراف از مناطق MPB میباشد [۱۱]. نکته قابل توجه دیگر در شکل۳، گذار فاز فروالكتريك-پاراالكتريك است كه براي همه نمونهها قابل مشاهده است، با این تفاوت که دمای گذار (با توجه به قله منحنی) برای نمونهها یکسان نبوده و برای نمونه ×=X تا نمونه ۲=۰/۰ روند کاهشی دارد. ولی پس از آن برای نمونه X=۰/۰۸ افزایش مییابد. زیرا افزودن CZO به میزبان PFN-PT دمای گذار را کاهش می-دهد که مشابه CZO در Bi(Mg0.5Ti0.5)O3-PbTiO3 است [۱۲]. مطابق شکل(b) ۳، تابع اتلاف وابستگی مشهودی نسبت به مقدار CZO جانشانی شده در میزبان PFN-PT نشان نمی دهد اما در گستره دمایی پائین، تابع اتلاف به طور کلی





#### نتيجه گيري

سرامیک PFN-PT/xCZO) بدون فاز ناخالصی با روش واکنش حالت جامد تشکیل شد. ثابت دیالکتریک برای نمونه •=X تا ۲۰/۰٤ افزایش مییابد که به دلیل شکل گیری مرز فاز مورفوتروپیک MPB در اثر حضور CZO است ومیتواند موجب بالا رفتن سهم حوزههای فروالکتریک به دیالکتریک شود. مشاهده حلقه پسماند قطبش –میدان حاکی از آن است که همه نمونهها خاصیت فروالکتریکی از خود نشان میدهند و بیشینه قطبش باقی مانده؛ ۲۲ (۲۲ μC/cm<sup>2</sup>) برای نمونه ۲۰/۰٤ به دست آمد.

مرجعها

[1] S. P. Singh, A. K. Singh and D. Pandey, "Crystallographic phases, phase transitions, and barrier layer formation in (1-x)[Pb(Fe<sub>0.5</sub>Nb<sub>0.5</sub>)O3]-xPbTiO<sub>3</sub>"; *J. Mater. Res* **18** (2003) 2677-2687.

[2] S.O. Leontsev, R.E. Eitel, "Dielectric and piezoelectric properties in Mn-modified (1-x)BiFeO<sub>3</sub>-xBaTiO<sub>3</sub> ceramics"; *J. Am. Ceram* Soc **92** (2009) 2957–2961.

[3] M.T. Buscaglia, L. Mitoseriu, V. Guscaglia, I. Pallecchi, M. Viviani, P. Nanni, A.S. Siri, "Preparation and characterization of the magnetoelectric xBiFeO<sub>3</sub>-(1-x)BaTiO<sub>3</sub> ceramics"; *J. Eur. Ceram. Soc* **26** (2006) 3027–3030.

[4] T. Wang, J.C. Hu, H.B. Yang, L. Jin, X.Y. Wei, C.C. Li, F. Yan, Y. Lin, "Dielectric relaxation and Maxwell-Wagner interface polarization in Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> doped 0.65BiFeO<sub>3</sub>-0.35BaTiO<sub>3</sub> ceramics"; *J. Appl. Phys* **121** (2017) 084103.

[5] T.T. Wang, H.M. Deng, W.L. Zhou, X.K. Meng, P.X. Yang, J.H. Chu, "Modified optical and magnetic properties at room-temperature across lead-free morphotropic phase boundary in (1-x)BiTi<sub>3/8</sub>Fe<sub>2/8</sub>Mg<sub>3/8</sub>O<sub>3</sub>xCaTiO<sub>3</sub>"; *Ceram. Int* **43** (2017) 6453–6459.

[6] T. Zheng, Z.G. Jiang, J.G. Wu, "Enhanced piezoelectricity in (1-x)Bi<sub>1.05</sub>Fe<sub>1-y</sub>AyO<sub>3</sub>-xBaTiO<sub>3</sub> lead-free ceramics: site engineering and wide phase boundary region"; *Dalton Trans* **45** (2016) 11277–11285.

[7] R. Ianos and P. Barvinschi, "Solution combustion synthesis of calcium zirconate, CaZrO<sub>3</sub>, powders"; *J. Solid State Chem* **183** (2010) 491-496.

[8] S. Mokhtari, H. Ahmadvand, M. J. Fesharaki, H.Papi, P. Kameli and H. Salamati, "Complex magnetoelectric effect in multiferroic composites: the case of PFN-PT/(Co, Ni)Fe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>"; J. Phys. D: App. Phys **52** (2019) 1-9.
[9] T.R. Shrout, S.J. Zhang, "Lead-free piezoelectric ceramics: alternatives

for PZT"; J. Elecroceram **19** (2007) 111–124. [10] L. Weston, A. Janotti, X.Y. Cui, C. Stampfl, C.G. Van de Walle, "Acceptor doping in the proton conductor SrZrO<sub>3</sub>"; *Phys. Chem. Chem. Phys* **19** (2017) 11485–11491.

[12] W. Zhao, R. Zu, F. Li and L. Li, "Structural, dielectric, ferroelectric and strain properties in CaZrO<sub>3</sub>-modified Bi(Mg<sub>0.5</sub>Ti<sub>0.5</sub>)O<sub>3</sub>–PbTiO<sub>3</sub> solid solutions"; *J. Alloys Comp* **591** (2014) 218-223.

[13] H.W. Joo, D.S. Kim, J.S. Kim, C.I. Cheon, "Piezoelectric properties of Mn-doped 0.75BiFeO<sub>3</sub>-0.25BaTiO<sub>3</sub> ceramics"; *Ceram. Int* **42** (2016) 10399–10404.



روند افزایشی دارد که می تواند به این دلیل باشد که CZO به عنوان یک رسانایی پروتونی قوی وارد میزبان PFN-PT می شود [۱۰]. شکل ٤ حلقه پسماند منحنی قطبش بر حسب میدان الکتریکی را برای سرامیک فروالکتریک PFN-PT/xCZO(1-x) نشان می دهد. همان طور که از شکل ٤ هم مشهود است همه نمونهها نشان می دهد. همان طور که از شکل ٤ هم مشهود است همه نمونهها خاصیت فروالکتریک از خود نشان می دهند و به جز نمونه فروالکتریک به عوامل متعددی نظیر نوع کامپوزیت، اندازه دانه، فروالکتریک به عوامل متعددی نظیر نوع کامپوزیت، اندازه دانه، ورش تهیه و حتی اندازه نمونه وابسته می باشد [۱۳]. بیشینه قطبش باقی مانده؛  $P_r$  (۲٤/۳۲ μс/cm<sup>2</sup>) برای نمونه ٤٠/٠٠ به دست آمد که ناشی از شکل گیری MPB است. همان طور که در قسمت قبل هم اشاره شد برای این نمونه ثابت دی الکتریک نیز





## پیشبینی گاف نواری نیمرساناها به روش DFT-1/2 و یادگیری ماشین

عابدی، سعید؛ هاشمیفر، سیدجواد؛ طریقی احمدپور، مهدی

دانشکاره فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، ۱۱۱۳٬۵۱۶ ۸۶

#### چکیدہ

گاف نواری یکی از ویژگیهای مهم در مواد نیمرسانا برای کاربردهای اپتیکی و الکترونی است که تا کنون از تقریبهای مختلفی در نظریه تابعی چگالی برای محاسبه آن استفاده شده است. از میان روشهای موجود، روش DFT-1/2 یکی از روشهای توانمند برای محاسبه مقادیر گاف نواری است که نتایج آن سازگاری خوبی با نتایج تجربی دارد. در این پژوهش ابتدا به محاسبه گاف نواری حدود یکصد بلور نیمرسانای دوتایی به روش DFT-1/2 میپردازیم و سپس با استفاده از یادگیری ماشین، یک مدل سریع برای پیشربینی این کمیت بر حسب ویژگیهای اتمی و بلوری تولید میکنیم. برای انجام این کار، ابتدا همبستگی ویژگیهای مختلف را با محاسبه ضریب پیرسون بررسی میکنیم. در ادامه، به انجام فرآیند یادگیری برای مدلهای رگرسیون خطی، ماشینهای بردار پشتیبان و جنگلهای تصادفی پرداخته و خطای ریشه میانگین مربعات دادههای آموزش و آزمون را محاسبه میکنیم.

واژه های کلیدی: یادگیری ماشین، نظریه تابعی چگالی، روش نیم ۲ شغال، مواد نیم رسانا

#### Prediction of the Bandgap of Semiconductor Using DFT-1/2 and Machine Learning

#### Abedi, Saeid; Hashemifar, Seyed Javad; Tarighi Ahmadpour, Mahdi

Department of Physics, Isfahan University of Technology, 8415683111 Isfahan

#### Abstract

The band gap is one of the important features of semiconductors for optical and electronic applications, and so far, various density functional approximations have been developed for calculating this property. The DFT-1/2 method is an efficient technique for calculating band gaps in close agreement with experiment. In this work, first, we calculate the DFT-1/2 band gap of about 100 binary semiconductors, and then, using machine learning techniques, we develop a fast model utilizing atomic and bulk features for the prediction of this property. To this end, we evaluate the correlation between the properties by calculating Pearson's correlation. We train the linear, support vector machines, and random forest regressions models in the following.

Keywords: machine learning, density functional theory, half-occupation method, semiconductor materials

PACS No. 70

جمله کاربردهای موفق یادگیری ماشین در این حوزه می توان به پیش بینی دقیق سیمای فاز، پیش بینی ساختارهای بلوری، پیش بینی خواص مواد، توسعه پتانسیل های بین اتمی و بسیاری موارد دیگر اشاره کرد. گاف نواری یکی از ویژگی های مهم مواد نیم رسانا است که برای بررسی خواص الکترونی و اپتیکی این مواد اهمیّت بسیاری دارد [۳ و۴]. برای محاسبه این ویژگی باید ساختار الکترونی ماده مورد

مقدمه

امروزه مدلهای یادگیری ماشین در زمینههای مختلفی مانند داده کاوی، تجزیه و تحلیل طیفها، کنترل رباتها، نرمافزارهای تشخیص صدا و تصویر، تشخیصهای پزشکی و ... استفاده شده است. اخیراً استفاده از مدلهای یادگیری ماشین برای شناسایی و کشف مواد جدید و نیز شناسایی خواص آنها در فیزیک حالت جامد و فیزیک مواد مورد توجه فراوان قرار گرفته است [۱و۲]. از



انرژی کل (Total ENE)، تعداد الکترون های ظرفیت کاتیون (Nc) و أنيون (Na)، تعداد اتمها در ياخته واحد (N/cell)، اختلاف الكترونگاتيوى بين كاتيون و آنيون (DE)، طول پيوند (Bond)، شعاع کووالانسی کاتیون (Rc) و آنیون (Ra)، انرژی یونیزاسیون كاتيون (IEc) و آنيون (IEa)، و گاف نوارى در تقريب PBEsol (Eg). ابتدا چگونگی توزیع دادهها را مورد بررسی قرار میدهیم که برای این منظور به بررسی ضریب همبستگی استاندارد (Pearson) می پردازیم. ضرایب همبستگی ارتباط بین متغیرها یا ویژگیهای یک مجموعه داده را نشان می دهد. ضریب همبستگی در بازه ۱ تا ۱-قرار دارد. مقادیر نزدیک به ۱ به معنی همبستگی مثبت قوی است و مقادیر نزدیک به ۱– به معنی این است که همبستگی منفی شدیدی بین دادهها وجود دارد. در شکل ۱ ماتریس همبستگی ویژگیها با توجه به مقدار ضریب همبستگی استاندارد آنها به صورت رنگی نمایش داده شده است (به دلیل تشابه بین ضرایب همبستگی بالای قطر اصلی و پایین آن، فقط نیمی از ماتریس همبستگی رسم شده است). گاف نواری روش نیم-اشغال با گاف PBEsol همبستگی بالایی دارد که نشان می دهد با افزایش مقادیر گافDFT-1/2 مقادیر گاف PBEsol نیز افزایش پیدا میکند. همچنین یک همبستگی بزرگ با علامت منفی بین شعاع کوالانسی آنیون و انرژی یونیزاسیون آن قابل مشاهده است و با افزایش مقادیر یکی، مقادیر ویژگی دیگر کاهشی خواهد بود. همچنین ضرایب نزدیک به صفر به معنی عدم



محاسبه قرار گیرد. یکی از روش های بسیار مرسوم برای محاسبه خواص الکترونی بلورها و مولکولها نظریه تابعی چگالی است. هرچند محاسبات مبتنی بر نظریه تابعی چگالی در پیش بینی خواص حالت پایه مواد عملکرد بسیار موفّقی داشته است، محاسبه خواص حالات برانگیخته و از جمله گاف نواری یکی از چالش های مهم در این رهیافت بوده است [۵]. پیش بینی گاف نواری در روش های مرسوم نظریه تابعی چگالی با خطای زیادی همراه است و برای تصحیح این خطا محاسبات تکمیلی مورد نیاز است. از روش های تکمیلی ارائه شده در این زمینه می توان به HSE، HSE روش می توان به GGA، DFT+U، DFT-1/2، GGAو GW اشاره کرد که نوعاً دارای هزینه محاسباتی بسیار بالایی هستند. از میان این روشها، روش نیم-اشغال [۶] یکی از روشهای توانمند، سریع و موثر برای محاسبه مقادير گاف نيمرساناها است که نتايج حاصل از آن سازگاری معقولی با مقادیر تجربی نشان داده است [۷]. این روش که برای محاسبه تصحیحات خود-انرژی در چارچوب تقریبهای مرسوم نظريه تابعي چگالي از جمله LDA و PBE توسط Ferreira و همکارانش در سال ۲۰۰۸ توسعه داده شده است، تعمیمی از روش نیم-اشغال Slater برای سیستمهای تناوبی است و در آن یک پتانسیل تصحیحی موضعی به پتانسیل کُن-شم افزوده میشود.

#### محاسبات

در این پژوهش به پیش بینی گاف نواری روش نیم-اشغال با استفاده از مدلهای یادگیری ماشین پرداخته ایم. برای این منظور ۱۰۰ نیم رسانای غیر مغناطیسی دو تایی با ساختارهای مختلف انتخاب و خواص فیزیکی آن ها با استفاده از رهیافت نظریه تابعی چگالی بلدست آمده است. در این پژوهش محاسبات با استفاده از بسته محاسباتی Exciting انجام گرفته که از روش پتانسیل کامل و پایه های موج تخت افزوده خطی، به همراه اربیتالهای جایگزیده (IAPW+I0) برای حل معادلات کُن-شم بهره می گیرد [۸]. مجموعه داده آماده شده در این مطالعه جهت استفاده در الگوریتم های یادگیری ماشین دارای توصیفگرهای زیر است: حجم یاخته واحد بر تعداد اتم ها (Vol/atom)، مدول حجمی (BM)،



در گام بعد، به آموزش الگوریتمهای یادگیری ماشین می پردازیم. برای این منظور از مدلهای رگرسیون خطی (Aidge و Ridge)، ماشینهای بردار پشتیبان (SVM) و نیز جنگلهای تصادفی (Random Forest) در کتابخانه sklearn در زبان برنامهنویسی پایتون استفاده می کنیم. ۸۰ درصد دادهها برای آموزش و ۲۰ درصد دادهها برای آزمون انتخاب شدهاند.

برای برازش دادهها به یک مدل خطی میتوان از دو روش Lasso یا Ridge استفاده کرد. در مدل رگرسیون Lasso تابع خطا به صورت زیر در نظر گرفته می شود:

$$E(w) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (t_i - w^T \cdot x)^2 + \alpha \sum_{i=1}^{n} |\omega_i|$$
  
c, c, all so the second secon

در این روابط  $\omega$  بردار وزنها، m تعداد نمونهها، t مقدار تابع هدف داده i ، x بردار ویژگی ها و  $\alpha$  ضریب منتظم سازی است. مقادیر بدست آمده با استفاده از grid search برای ضریب منتظم سازی  $\alpha$  برای مدلهای Lasso و Ridge به ترتیب برابر با ۰/۰۱ و ۰/۰ میباشد. با استفاده از این مقادیر به آموزش مدلهای خطی پرداختیم که نتایج حاصل از پیش بینی مدل و مقادیر محاسبه شده توسط نظریه تابعی چگالی برای گاف DFT-1/2 در شکل ۲ ارائه شدهاند:



شکل ۲. مقایسه مقادیر پیش بینی شده توسط مدل های خطی یادگیری ماشین و نتایج بدست آمده از محاسبات نظریه تابعی چگالی

در این نمودار، هرچه نقاط آبی یا قرمز نزدیک تر به نیمساز (نقطهچین) باشند، نشان دهنده همخوانی بهتر مقدار پیشبینی شده توسط یادگیری ماشین با مقادیر نظریه تابعی چگالی می باشد. برای بررسی دقت مدل های بدست آمده، لازم است معیارهای خطا را برای بررسی تعمیم پذیری مدل های یادگیری ماشین بررسی کرد که از جمله آنها می توان به میانگین اندازه خطاها (MAE) و ریشه میانگین مربعات خطا (RMSE) اشاره کرد. این معیارها برای مدل های مقدان مورد محاسبه قرار گرفته و نتایج در جدول ۱ ارائه شده است. همچنین مقدار امتیاز P2 و نیز بیشینه مقدار خطا برای هر مدل در این جدول ارائه شده است. همانطور که قابل مشاهده است، مقادیر خطای RMSE برای مجموعههای آموزش و آزمون مدر بدین مقدار امتیاز عد

جدول۱ : معیارهای خطای محاسبه شده برای الگوریتمهای مختلف. سطر اول و دوم به ترتیب نشان دهنده خطای مجموعه آموزش و آزمون میباشد.

	RMSE	MAE	R2 score	MaxAE
Tana	۰/V۱	۰/۵	• /۸۳	۲/۳۶
Lasso	۰/V۶	•/۶١	٠/٩	1/89
D'1	• /۶٨	•/۴٩	• /٨۴	۲/۱۸
Ridge	۰/٧۴	•/۵۴	•/٩١	۲/۰
arn (	• /٣٨	•/14	•/٩۵	۲/۱۳
SVM	1/11	• /٧٩	• /VV	۳/۸۵
Random Forest	۰/۲۶	•/\A	•/٩٨	• /٨۵
	۲\۱	۰/۷۱	۰/V۶	٣/۶٩

مدل ماشین های بردار پشتیبان در سال های اخیر عملکرد بسیار خوبی برای طبقهبندی خطی و غیرخطی، رگرسیون و حتی شناسایی داده های دور نشان داده است. مهمترین هایپرپارامتر های این الگوریتم شامل *Y* و C میباشد که برای آن مقادیر ۲۰/۰ و ۶ بدست آمد. مقایسه مقادیر حاصل از پیش بینی یادگیری ماشین و مقادیر نظری در شکل ۳ نشان داده شده است. در این روش نیز مقادیر خطای ریشه میانگین مربعات برای مجموعه آموزش برابر با ۲۸/۰ بدست آمد و این خطا برای مجموعه آزمون برابر با ۱/۱۷ شد که نشان دهنده عملکرد بسیار بهتر این مدل در یادگیری داده ها در مقایسه با مدل های خطی میباشد اما خطای بسیار بیشتر مدل روی داده های آموزشی بیانگر بیش برازش این مدل میباشد.



جنگلهای تصادفی یکی از مدلهای یادگیری جمعی است که در آن زیرمجموعههایی از نمونههای آموزشی و ویژگیها به صورت مجزا برای آموزش درختهای مختلف، مورد استفاده قرار می گیرند و نتیجه نهایی به صورت ترکیبی از نتایج حاصل از همه درختها بدست می آید. برای این منظور ابتدا پارامترهای بیشینه عمق درخت (max\_depth) و تعداد درختها (n\_estimators) مورد محاسبه قرار گرفتند و به ترتیب مقادیر ۱۰ و ۱۷ برای آنها بدست آمد. سپس مدل را آموزش دادیم که نتیجه حاصل با مقادیر نظریه تابعی چگالی در شکل ۳ مقایسه شدهاند:



شکل ۳. مقایسه مقادیر پیشبینی شده توسط مدلهای ماشین بردار پشتیبان و جنگلهای تصادفی و نتایج بدست آمده از محاسبات نظریه تابعی چگالی برای تحلیل مدل جنگل تصادفی به محاسبه مقادیر افزودنی شاپلی (SHAP) پرداختیم (شکل ۴). گاف PBE، اختلاف الکترونگاتیوی و انرژی یونیزاسیون دارای مقادیر توصیفهای افزودنی شاپلی بیشتری در مقایسه با بقیه ویژگیها هستند. با توجه به شکل، نمونههایی که مقدار گاف PBEsol برای آنها زیاد است (و بارنگ قرمز نشان داده شدهاند) تاثیر زیاد و مثبتی در پیشبینی دارند (مقادیر انرژی یونیزاسیون آنیون، تعداد الکترونهای ظرفیت آنیون، شعاع انرژی یونیزاسیون آنیون، تعداد الکترونهای ظرفیت آنیون، شعاع کوولانسی و تعداد اتمهای یاخته مقادیر SHAP نزدیک به صفر دارند که نشان می دهد ویژگیهای مهمی نیستند و مقادیر آنها تاثیر کمی در مقادیر پیش بینی مدل خواهند داشت.



شکل ۴. مقادیر توصیفهای افزودنی شاپلی برای توصیفگرهای موجود در مجموعه دادهها. رنگ های آبی و قرمز مقدار اندازه هر ویژگی را نشان میدهد.

#### نتيجهگيري

در این پروژه با تولید مجموعه داده برای ۱۰۰ نیمرسانای غیرمغناطیسی، به پیشبینی مقدار گاف نواری با استفاده از مدلهای رگرسیون خطی، ماشینهای بردار پشتیبان و جنگلهای تصادفی پرداخته شد. مقدار خطای ریشه میانگین مربعات دادههای آموزش و آزمون نیز برای هر مدل محاسبه شد. همچنین به منظور تفسیر مدلها از روش توصیفهای افزودنی شاپلی استفاده شد و نمودارهای مرتبط با اهمیّت ویژگیها برای هر مدل ترسیم شد.

مرجعها

- [1] LeSar, R., "Materials informatics: An emerging technology for materials development", *Statistical Analysis and Data Mining: The* ASA Data Science Journal, 1, No. 6, (2009) 372–374.
- [Y] Rajan, K., "Materials informatics", *Materials Today*, 8, No. 10, (2005) pp. 38–45
- [<sup>¶</sup>] Sze, S. M. et al., "Physics of semiconductor devices", Wiley, (2006).
- [<sup>\*</sup>] Neamen, D. "Semiconductor physics and devices", McGraw-Hill Higher Education, (2011)
- [4] Manish, J. et al., "Reliability of hybrid functionals in predicting band gaps", *Phys. Rev. Lett*, **107**, (2011), p. 216806.
- [<sup>\*</sup>] Slater J. C. et al., "Self-Consistent-Field Xα Cluster Method for Polyatomic Molecules and Solids", Phys. Rev. B 5, (1972) p. 844.
- [Y] L. G. Ferreira et al., "Slater half-occupation technique revisited: the LDA-1/2 and GGA-1/2 approaches for atomic ionization energies and band gaps in semiconductors", *AIP Advances* 1, (2011) p. 032119.
- [A] Gulans, A. et al, "Exciting: a full-potential all-electron package implementing density-functional theory and many-body perturbation theory", *Journal of Physics: Condensed Matter*, 26, No. 36, (2014) p. 363202.





## اثر جایگزینی هMoO<sub>r</sub>/V<sub>r</sub>O بر ویژگیهای نوری خطی و غیر خطی شیشههای اکسیدی ۳MoO<sub>r</sub>-V<sub>r</sub>O

موسیوند، زهرا؛ سوری، داریوش

دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک ، دانشگاه ملایر

#### چکیدہ

در کار حاضر، جهت ارزیابی ویژگیهای نوری خطی و غیر خطی نمونههای تودهای ۲۰۰۳،۷۷٬۵۰۰×۲۰۰۰،۲۰۰۲ تهیه شده به روش فرونشانی سریع مذاب (x درصد مولی اکسید مولیدن است)، از مقادیر گاف انرژی این نمونهها استفاده شده است. با استفاده از این دادهها مقادیر ضریب شکست، پذیرفتاری نوری خطی و غیرخطی و ضریب شکست وابسته به شدت محاسبه شده است. با توجه به مقادیر بدست آمده برای کمیتهای ذکرشده نمونهی حاوی ۱۰ درصد مولی از اکسید مولیبدن گزینهی خوبی برای فیرهای نوری است.

# The effect of $MoO_r/V_rO_o$ substitution on the linear and nonlinear optical properties of $TeO_r-V_rO_o-MoO_r$ oxide glasses

#### Mousivand, Zahra; Souri, Dariush

' Faculty of Science, Department of Physics, Malayer University

#### Abstract

In this work, to evaluate the linear and non-linear optical properties of  $\pounds \cdot TeO_{+}(\neg \cdot \cdot x)V_{\uparrow}O_{\bullet}-xMoO_{+}$  bulk samples prepared by rapid melt quenching method, their band gap values have been used. Using band gap values, refractive index, linear and non-linear optical susceptibilities and intensity dependent refractive index have been evaluated Based on data for the mentioned quantities, the sample owing  $\neg \cdot \rangle$  of molybdenum oxide is a good candidate in optical fibers.

PACS No. VA

ودردسترس، ویژگی های غیرسمی، گذارفروسرخ، ضریب شکست بالا و ثابت دیالکتریک بالا[ ۳و ۵و۲]. در صنعت مخابرات شیشه هایی برای ساخت فیبرهای نوری یا موجبرها لازم است که گاف انرژی کمتر و در نتیجه ضریب شکست غیرخطی بالاتر داشته باشند وهمچنین این شیشه ها باید پایداری محیطی و گرمایی بالایی داشته باشند تا از تشکیل فاز بلوری جلوگیری شده ودر نتیجه انتقال سیگنال بهتر و با پراکندگی

مقدمه

شیشههای اکسیدی شامل اکسیدهای فلزات واسطه در سالهای اخیر از جنبههای گوناگون از قبیل خواص نوری، ترموالکتریکی، ساختاری و الکتریکی بهطور گستردهای مورد مطالعه قرار گرفته اند[٦-1]. برخی ویژگیهای منحصر به فرد شیشههای تلوریمی عبارتند از: توانایی بالای تشکیل شیشه، پایداری محیطی وشیمیایی، استحکام مکانیکی خوب، نمگیری پایین، نقطهی ذوب پایین



کمترصورت پذیرد. در کار حاضربا استفاده از مقادیر گاف انرژی(E<sub>g</sub><sup>DASF</sup>) نمونه های ۲۵۵۰-۲۸۵۰x(۲۰۰۲)-۶۰۲۵ ضریب شکست خطی (n<sub>opt</sub>)، پذیرفتارینوریخطی(<sup>(۱)</sup>) )، پذیرفتاری نوری غیر خطی(<sup>(۲)</sup> )، وضریب شکست وابسته به شدت(n<sub>r</sub>) نمونههای مورد نظر محاسبه شده تا نمونهی بهینه از نظر پتانسیل کاربردی نوری معرفی شود.

## روش آزمایشگاهی

شیشه های اکسیدی ۲۰۵۰-۵۰۷(۲۰-۲۰)-۶۰۷ که پس از **این** TVMx نامیده می شوند (x درصد مولی مؤلفهی ۳۵۰۰ با مقادیر ۲۰،۵۰،۲۰،۲۰،۲۰،۰۱۰ می باشد)، از ذوب مخلوط مناسب پودرهای مؤلفه های تشکیل دهنده با درصد خلوص بالا به روش سرمایش سریع مذاب ساخته شده اند. علاوه بر نمونهی تودهای، لایه های آمورف جهت اندازه گیری نوری با دمش در مذاب با ویسکوزیته بالا از طریق لولهی باریک بور –سیلیکا حاصل شده اند.جزئیات روش ساخت نمونه در مرجع [۵, 7] آمده است.

#### بحث و نتیجه گیری

#### الف) مشخصه یابی پر تو X

شکل ۱ الگوی پراش پرتو X نمونه های توده ای را که به روش پودری انجام شده است نشان میدهد. عدم وجود قله های بلوری در این الگوها طبیعت آمورف و ماهیت غیر بلوری شیشه ها را تایید می کند.



شکل ۲ نمودار نوعی طیف جذبی ترکیبات TVMx در گسترهی فرابنفش-مرئی را نشان میدهد که با استفاده از نمودار می توان

گاف انرژی را بدست آورد. دادههای گاف انرژی (Eg<sup>DASF</sup>) نمونههای مورد نظر با روش DASF(مشتق انطباق طیف جذبی) بعنوان روشی دقیق و کارآمد در مرجع [۲, ۷] با جزئیات کامل محاسبه شده و نتایج بدست آمده در جدول ۱ آمده است. همانطور که مشاهده می شود، نمونهی ۲۷M۱۰ دارای کمترین گاف انرژی می باشد. از طرفی افزایش گاف در ۲۰M۷۰ و ۲۷M۲۰ می تواند کاهش چگالی اکسیژن غیر پیوندی باشد



شکل ۲: نمودارهای طیف جذب نوری نمونههای TVMx **پ) ضریب شکست، پذیرفتاری نوری خطی و غیر خطی** باتوجه به آنچه در "مقدمه" ذکر شد، هدف این پژوهش تعیین پذیرفتاری نوری خطی وغیر خطی نمونههای مورد بررسی میباشد. بنابراین ابتدا به مروری کوتاه بر مفاهیم و روابط اپتیک خطی و غیر خطی می پردازیم.

در بحث نورشناسی پدیده هایی مانند عبور، بازتاب، شکست و دوشکستی در مقوله ای به نام اپتیک خطی قرار می گیرند [۸].اما پدیده های نوری غیر خطی وقتی اتفاق می افتند که پاسخ سیستم مادی به نور تابیده یک پاسخ غیر خطی باشد.آغاز زمینه ی پژوهش اپتیک غیر خطی معمولا به کشف تولید هارمونیک دوم توسط فرانکن و همکارانش به فاصله ی کوتاهی پس از ساخت اولین لیزر توسط مایمن در سال ۱۹۲۰ برمی گردد. در اپتیک غیر خطی پاسخ محیط به صورت یک سری توانی از میدان الکتریکی مطابق رابطه ی ۱ می باشد [۹].

$$\tilde{P}(t) = \varepsilon \cdot (\chi^{(1)}E(t) + \chi^{(1)}E^{(1)}(t) + \chi^{(1)}E^{(1)}(t) + \cdots) = \tilde{P}^{(1)}(t) + \tilde{P}^{(1)}(t) + \tilde{P}^{(1)}(t) + \tilde{P}^{(1)}(t) \cdots$$
(1)

در این رابطه کمیت های <sup>(۱)</sup>  $\chi$  <sup>(۲)</sup>  $\chi$  <sup>(۳)</sup> , <sup>(۳)</sup> به ترتیب پذیرفتاری ناحیه ی خطی، پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه ی دو وسه میباشند. دررابطه ۱، جمله ی اول اثرپذیری اپتیک خطی است که ضریب شکست و ضریب جذب را مشخص می کند. جمله ی سوم نمایانگر غیرخطی شدگی مرتبه ی سوم است، که این جمله عامل بسیاری از فرآیندهای اپتیک غیرخطی مانند تولید هارمونیک سوم، ضریب شکست وابسته به شدت، اثرکر، تزویج فاز و....می باشد. از طرفی جمله دوم در سامانه های بی نظم و همچنین ساختارهای دارای تقارن وارون مرکزی صفر است. برای تعیین ضریب شکست رابطه ی۲ که توسط دیمیتر و ساکار پیشنهاد شده است استفاده می-شود که با انجام عملیات ساده ی ریاضی از رابطه ی ۲ به رابطه ی ۳

$$\frac{n_{opt}^{\gamma} - 1}{n_{opt}^{\gamma} + \gamma} = 1 - \sqrt{\frac{E_{gap}^{DASF}}{\gamma}}$$
(7)

$$n_{opt} = \left( \tau \sqrt{\frac{o}{E_{gap}^{DASF}} - \tau} \right)^{1/o}$$
( $\tau$ )

با توجه به شکل ۳ ونتایج جدول ۱ مشاهده می شود که گاف انرژی در ۰/۲=،MoOr/۷،۵ (یا بعبارتی در نمونهی ۲۷M۱۰) کمترین مقدار و ضریب شکست بیشترین مقدار را دارد که موید رابطه معکوس و منطقی این دو کمیت است.



$$\chi^{(t)} = A(\chi^{(1)})^{\xi} = \frac{A}{(\xi \pi)^{\xi}} (n_{opt}^{\xi} - 1)^{\xi}$$
 (0)

که پارامتر A توسط آدایر وهمکارانش گزارش شده است، در اینجا (esu) $^{(1)}$  ۱۰ $^{-1/2}$  در نظر گرفته شده است. مقادیر  $\chi^{(1)}$ و  $\chi^{(7)}$  در جدول ۱ بیان شده است .در شکل ٤ مشاهده می شود برای حالتی که ۲/۰=ه $MoO_7/V_7O_7$  است پذیرفتاری نوری خطی و پذیرفتاری نوری غیر خطی مرتبه ی سوم بیشترین مقدار را دارند و با افزایش ه $MoO_7/V_7O_7$  مقادیر پذیرفتاری کاهش می یابند.



 $N=n_{opt}+n_{r}I$ (7)

که در آن n<sub>opt</sub> همان ضریب شکست اپتیکی و n<sub>r</sub> ضریب شکست وابسته به شدت نور فرودی است است که میزان غیر خطی بودن محیط را نشان میدهد. برای بدست آوردن n<sub>r</sub> از رابطهی ۷ استفاده می شود[۱۱].

 $n_{\gamma} = \frac{\gamma \tau_{\pi \chi}(\gamma)}{n_{\text{opt}}} \tag{(v)}$ 

با توجه به جدول ۱ و شکل ۵ مشاهده میشود که در شرایط ۲.۰۰ه بیشترین مقدار را دارد و با افزایش نسبت (۵.۰۷۷/۱۳۵۰) مقدار ۳۲ کاهش مییابد.



MoO<sub>y</sub>/VyO<sub>o</sub>

نتایج حاصل در خصوص ویژگیهای نوری غیر خطی شیشههای اکسیدی TVMx موید رابطه معکوس گاف انرژی و پذیرفتاری نوری غیر خطی مرتبه سوم نمونه هاست. کمترین گاف انرژی و بیشترین پذیرفتاری نوری متعلق به نمونهی TVMx بوده که نشاندهندهی پتانسیل بالای این نمونه در کاربردهای نوری ازجمله فیبرهای نوری و انتقال سیگنال می باشد؛ شایان توجه است که چنین کاربردهایی مستلزم پایداری محیطی و گرمایی نمونه ها و

مقاومت بالای آنها در برابر تغییرات ساختاری میباشد که انتقال سیگنال با حداقل پراکندگی صورت پذیرد. براساس آنچه در مرجع شماره ۷ در خصوص پایداری گرمایی و شوک ناپذیری همین نمونهها منتشر شده است، نمونه ۲۷M۱۰ از میان سایر نمونهها دارای بالاترین پایداری است و کاربرد نوری نمونه را مورد تایید مجدد قرار می دهد.

#### نتیجهگیری کلی

 ۱) گاف انرژی برای حالتی که ۲/۰=۵MoO<sub>r</sub>/V<sub>۲</sub>O کمترین مقدار و n<sub>opt</sub> ، <sup>(۱)</sup>χ ، <sup>(۳)</sup>χ و n<sub>y</sub> بیشترین مقدار را دارند.
 ۲)با افزایش نسبتهMoO<sub>r</sub>/V<sub>۲</sub>O گاف انرژی افزایش یافته و کمیتهای n<sub>opt</sub> ، <sup>(۱)</sup>χ ، <sup>(۳)</sup>χ و n<sub>r</sub> کاهش می یابند.
 ۳) با توجه به پایداری گرمایی بالای نمونه ی ۱۰TVM و نتایج بدست آمده در این پژوهش این نمونه گزینه ی مناسبی برای کاربردهای نوری و فیبرهای نوری است.

و n <sub>r</sub> برای نمونه TVMx	$\chi_{(L)}$ , $\chi_{(I)}$ ,	$n_{opt}$ , $E_g^{\ DASF}$	جدول ۱: مقادير
----------------------------------	-------------------------------	----------------------------	----------------

sampel	TeOγ	V۲O۵	MoOr	MoOr/VrO.	$E_{a}^{DASF}(eV)$	n <sub>opt</sub>	χ <sup>(*)</sup>	$\chi^{(r)} \times 1 \cdot \cdot \cdot$	$n_{r_{\times}}$ ) ) .
	mol%	mol%	mol%		6 \			(esu)	(esu)
TVM•	٤.	۲	•	•	۲/٥٠٤	٢/٥٤٥	•/٤٣٦	٠/٠٦١	٠/٩١٠
TVM۱۰	٤.	۰.	1.	٠/٢	۲/۳۸۰	۲/۵۸۸	•/٤٥٣	•/•٧١	1/• 27
TVM۲۰	٤٠	٤.	۲.	•/0	۲/٤٦٧	۲/٥٥٨	•/٤٤١	•/•٦٤	•/٩٤٨
TVM۳۰	٤.	۳.	۳.	1	۲/09١	۲/٥١٧	•/270	•/•00	•/٨٢٧
TVM٤٠	٤.	۲.	٤.	٢	۲/۷۲۸	۲/٤٧٤	۰/٤٠٨	•/• £V	•/٧١٥
TVM0.	٤.	).	٥.	0	٣/١٦١	۲/۳٥٥	•/٣٦٢	•/•۲٩	•/٤٦٦
TVM٦٠	٤.	•	٦٠	$\infty$	٣/٣٩٧	۲/۲۹۸	•/ ٣ ٤ ١	•/• ٣٣	•/770

- [v] D. Souri, Z. E. Tahan, Applied Physics B:Lasers and Optics 114 (1),(1.10) TVT-TV9
- [A] Frank.L.Pedrotti,Leno S.Pedrotti "introduction to optics",Prentice Hall,(1997)".
- [4] R. W. Boyd; "Nonlinear Optics"; Y<sup>th</sup> edition, Academic Press. (Y···Y) chapter Y.
- [1.] H. Ticha and L Tichy. Journal of Optoelectronics and Advanced Materials  $i \uparrow (\uparrow \cdot \cdot \uparrow) \neg \land \land \neg$ .
- [11] H.H.Somaily, H.Algarni, Y.S.Rammah , Amani Alalawi, Amani Alalawi, C.Mutuwong, M.S.Al-Buriahi. Journal of Ceramics International £V (Y-Y) 101Y-101Y-

['] D. Souri, M. Elahi; Physica Scripta Vo (Y···Y) Y19-YYY.

- [Y] D. Souri; Journal of Physics D: Applied Physics  $\mathfrak{t}(\mathsf{Y}, \mathsf{A})$  $\mathfrak{h}, \mathfrak{h}, \mathfrak{h}$
- [r] A.H. Khafagy, A.A. El-Adawy, A.A. Higazy, S. El-Rabaie, A.S. Eid; Journal of Non-Crystalline Solids rot (Υ··Λ) ΥιοΥ.
- [٤] M. M. Ahmad, E. S. Yousef, E. S. Moustafa; Physica B: Condensed Matter YV1 (Y···) V٤-A·
- [°] D. Souri, S. F.Hosseini, A. Nouri Emamzadeh, Journal of Inorganic and Organometallic Materials and Polymers **\*1** (**\* • T1**)**\***AVY-**TA9•**.
- S.F. Hosseini, D. Souri, Journal of Materials Science: Materials in Electronics "" (Y Y) 150-1-15010.



تأثیر برهمکنش الکترون-الکترون بر اثر هال غیر عادی و اثر هال اسپینی میر ، مسلم <sup>1</sup>؛ عابدین پور، سعید<sup>2</sup> <sup>ال</sup>حروه فیزیک، دانشگاه زابل، زابل <sup>2</sup>دانشکده فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، بلوار استاد ثبوتی، زنجان

چکيده

تاثیر برهمکنش الکترون-الکترون بر رسانندگیهای ذاتی هال غیر عادی و هال اسپینی را در گاز الکترونی دوبعدی مغناطیسی با جفت شدگی اسپین-مدار راشبا بررسی میکنیم. شکست ناوردایی گالیلهای در این سیستم باعث تقویت اثرات بس ذرهای می شود. در حد سیستم تمیز یا حد فرکانسهای بالا، رسانندگیهای هال غیر عادی و اسپینی بر حسب توابع پاسخ اسپین-اسپین به دست می آیند. ما در اینجا اثرات برهمکنش الکترون-الکترون را در تقریب هابارد که فراتر از تقریب فاز تصادفی است، در نظر گرفته، سپس رسانندگیهای ذاتی هال غیر عادی و اسپینی را در این تقریب محاسبه کردیم. رسانندگی های هان خیر عادی و دونواری افزایش می بابد در حالی که رسانندگی هال اسپینی با افزایش برهم کنش در رژیم دو نواری افزایش و در رژیم تک علامت در رسانندگی هال اسپینی مشاهده می شود.

**واژه های کلیدی:** اثر هال غیر عادی، اثر هال اسپینی، نظریه پاسخ خطی، تقریب فاز تصادفی.

#### Effects of electron-electron interaction on the anomalous Hall and spin Hall effects Mir, Moslem<sup>1</sup>; Abedinpour, Saeed H.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, University of Zabol (UOZ), Zabol 98615-538, Iran <sup>2</sup> Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences (IASBS), Zanjan 45137-66731, Iran

#### Abstract

We investigate the effects of the electron-electron interaction on the intrinsic anomalous and spin Hall conductivities in a magnetic two-dimensional electron gas with Rashba spin-orbit coupling. The breakdown of Galilean invariance in this system enhances the effects of electron-electron interaction. In the clean system or high-frequency limit, the anomalous and spin Hall conductivities are obtained in terms of the spin-spin response functions. Here, we considered the electron-electron interaction effects within the Hubbard approximation for the local field factor, which is beyond the random phase approximation, then obtained the intrinsic anomalous and spin Hall conductivity increases with increasing interaction strength in single and two-band regimes. In contrast, spin Hall conductivity increases with increasing interaction strength in the two-band regime and decreases with increasing interaction in the single-band regime. Also, a sign reversal is observed in the spin Hall conductivity.

Keywords: anomalous Hall effect, spin Hall effect, linear response theory, random phase approximation

PACS No. 72

مکانیسمهای میکروسکوپی متفاوتی در AHE و SHE سهم دارند که بهطور کلی به دو دسته ذاتی و خارجی تقسیم میشوند. در مکانیسمهای ذاتی ساختار الکترونی ماده نقش دارد. مکانیسم خارجی ناشی از پراکندگی حاملهای بار از ناخالصیها است و خود به دو بخش پرش کناری و پراکندگی انحرافی تقسیم میشود. در حد

در اثر هال غیرعادی (AHE)، میدان الکتریکی طولی باعث ایجاد جریان بار عرضی در غیاب میدان مغناطیسی خارجی می شود. اثر هال اسپینی (SHE) عبارت است از ایجاد جریان اسپینی عرضی که در نتیجه اعمال میدان الکتریکی طولی در یک ماده ایجاد می شود.

مقدمه

و



 $H_{int} = \frac{1}{2s} \sum_{q \neq 0} \nu(q) \sum_{\substack{k,\sigma \\ k',\sigma'}} \hat{c}^{\dagger}_{k-q,\sigma} \hat{c}^{\dagger}_{k'+q,\sigma'} \hat{c}_{k',\sigma'} \hat{c}_{k,\sigma}$ (3) (3)  $\sum_{k,\sigma} m \in \Delta$  به ترتیب جرم الکترون، شدت جفت شدگی اسپین-مدار راشبا و انرژی شکافتگی زیمن ناشی از میدان تبادلی هستند. ماتریس  $\pi^{\tau}$  به ازای  $\alpha = x, y, z$  نشان دهنده ماتریس های پائولی و به ازای  $0 = \alpha$  نشان دهنده ماتریس یکانی است. همچنین S مساحت سیستم و  $\nu(q) = 2\pi e^2/q$  تبدیل فوریه برهمکنش کولنی در دو بعد است.

در اینجا H<sub>int</sub> هامیلتونی اصلی سیستم است و H<sub>int</sub> را به صورت اختلال در نظر میگیریم.

وارد کردن برهم کنش کولنی به طور کامل امکان پذیر نیست. در اینجا برهم کنش الکترون –الکترون را در تقریب هابارد در نظر می گیریم. این تقریب فراتر از تقریب فاز تصادفی است. برهم کنش مؤثر در تقریب هابارد برای سیستمهای با برهم کنش اسپین –مدار برابر است با[1]

 $W_{lphaeta}(q) = v(q)\delta_{lpha,0}\delta_{eta,0} - \frac{1}{2}v_H(q)\delta_{lpha,eta}$  (4)  $\sum V_H(q) = v(\sqrt{k_F^2 + q^2})$  (4)  $v_H(q) = v(\sqrt{k_F^2 + q$ 

در تقریب هابارد توابع پاسخ اسپین-چگالی با برهمکنش از رابطه زیر به دست میآیند[1,2]

 $\chi(q,\omega) = [1 - \chi^0(q,\omega)W(q,\omega)]^{-1}\chi^0(q,\omega)$ (5)  $\sum_{k=0}^{\infty} \chi(q,\omega) = \chi(q,\omega) + \chi^0(q,\omega) + \chi^0(q,\omega)$   $\lim_{k \to \infty} \chi(q,\omega) = \chi(q,\omega) + \chi(q,\omega)$   $\lim_{k \to \infty} \chi(q,\omega) = \chi(q,\omega) + \chi(q,\omega)$ 

موجهای بلند فقط عناصر زیر از ماتریس توابع پاسخ با برهمکنش غیر صفر هستند[2]

$$\chi_{xx}(\omega) = \chi_{yy}(\omega)$$

$$= \frac{\left[1 + \frac{U}{2}\chi_{yy}^{0}(\omega)\right]\chi_{yy}^{0}(\omega) + \frac{U}{2}\left[\chi_{yy}^{0}(\omega)\right]^{2}}{\Gamma(U,\omega)}$$

$$\chi_{xy}(\omega) = -\chi_{yx}(\omega) = \frac{\chi_{xy}^{0}(\omega)}{\Gamma(U,\omega)}$$
(6)

تمیز یا حد فرکانس های بالا، سهم های خارجی نقشی در رسانندگی-های هال غیر عادی و اسپینی ندارند.

در اینجا یک گاز الکترونی دوبعدی با جفت شدگی اسپین-مدار راشبا را در نظر میگیریم که در یک میدان مغناطیسی خارجی قرار دارد. برهمکنش اسپین-مدار راشبا باعث شکست ناوردایی گالیلهای در این سیستم میشود، در نتیجه بسیاری از کمیتهای فیزیکی به برهمکنش الکترون-الکترون وابسته میشوند.

در این مقاله هدف ما بررسی اثرات برهم کنش الکترون – الکترون بر رسانندگیهای ذاتی هال غیرعادی و اسپینی در گاز الکترونی دوبعدی مغناطیسی با برهم کنش اسپین – مدار راشبا است. برهم کنش الکترون – الکترون را فراتر از تقریب فاز تصادفی، در تقریب هابارد برای عامل میدان موضعی در نظر میگیریم. در حد تمیز یا حد فرکانسهای بالا، رسانندگیهای ذاتی هال غیرعادی و اسپینی بر مسب توابع پاسخ با برهم کنش اسپین – اسپین نوشته می شوند [1,2]. با در نظر گرفتن تقریب هابارد برای این سیستم، توابع پاسخ اسپین – اسپین با برهم کنش بر حسب توابع پاسخ اسپین – اسپین بدون برهم-کنش محاسبه می شوند. مشاهده می کنیم که برهم کنش الکترون – الکترون باعث افزایش رسانندگی ایستایی هال غیر عادی در هر دو رژیم سیستم می شود در حالی که افزایش برهم کنش، رسانندگی هال ایسینی را در رژیم دو نواری افزایش می دهد و باعث کاهش آن در رژیم تک نواری می شود. همچنین یک تغییر علامت در رسانندگی

## هامیلتونی و توابع پاسخ خطی اسپین-چگالی گاز الکترونی دو بعدی مغناطیسی با جفت شدگی اسپین-مدار راشبا

یک گاز الکترونی دوبعدی با جفتشدگی اسپین-مدار راشبا را دریک میدان تبادلی عمودی در نظر بگیرید. همچنین فرض کنید که الکترونها با یکدیگر برهمکنش کولنی دارند، هامیلتونی این سیستم برابر است

$$H = H_0 + H_{int} \tag{1}$$

که

$$\begin{split} H_0 &= \\ \sum_{k,\sigma,\sigma'} \left( \frac{k^2}{2m} \, \tau^0 + \alpha_R (\hat{z} \times \vec{\tau}) . \, \vec{k} + \Delta \, \tau^z \right) \, \hat{c}^{\dagger}_{k,\sigma} \hat{c}_{k,\sigma} \end{split}$$
(2)

$$\chi_{zz}(\omega) = \frac{1 + \frac{U}{2}\chi_{zz}^{0}(\omega)}{\Gamma(U,\omega)}$$

$$\Gamma(U,\omega) = \left[1 + \frac{U}{2}\chi^0_{yy}(\omega)\right]^2 + \left[\frac{U}{2}\chi^0_{xy}(\omega)\right]^2$$
  
relation is a set of the set of the

که

و

$$\chi_{AB} = \frac{1}{s} \langle \langle \hat{A} ; \hat{B} \rangle \rangle_{\omega} = -\frac{i}{s} \int_{0}^{\infty} dt \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(0)] \rangle e^{i(\omega t + i\eta)t}$$
(7)  
رسانندگی های هال غیرعادی و اسپینی

رسانندگی های هال غیر عادی و هال اسپینی به ترتیب عبارتند از جریانهای بار و اسپین قطبیده که در پاسخ به میدان الکتریکی همگن ایجاد میشوند. یک سیستم دو بعدی را در صفحه XX در نظر بگیرید، اگر میدان الکتریکی E در راستای محور X به این سیستم اعمال شود، مؤلفهی Y جریان ذرات  $(j_y)$  و مؤلفه Y جریان اسپینی که در راستای Z قطبیده شده است، از رابطه های زیر به دست میآیند  $j_y(\omega) = \sigma_{yx}^{SH}(\omega)E_x(\omega)$  (8)  $j_y^2(\omega) = \sigma_{yx}^{SH}(\omega)E_x(\omega)$ 

در معادلات بالا (۵  $\sigma_{yx}^{AH}(\omega)$  رسانندگی دینامیکی هال غیر عادی است و مقدار آن از رابطه زیر به دست میآید

$$\sigma_{yx}^{AH}(\omega) = \frac{i e^2}{\omega} \chi_{j_y j_x}(\omega)$$
(9)  
همچنین ( $\sigma_{yx}^{SH}(\omega)$  رسانندگی دینامیکی هال اسپینی است که مقدار  
آن برابر است با

$$\sigma_{yx}^{SH}(\omega) = \frac{ie}{\omega} \chi_{j_y^z j_x}(\omega)$$
(10)

توابع پاسخ معادلات بالا در معادله (7) تعریف شده است. رسانندگیهای هال غیر عادی و اسپینی در حد فرکانسهای بالا یا حد تمیز از روابط زیر به دست میآیند

$$\sigma_{yx}^{AH}(\omega) = \frac{i e^2 \alpha_R^2}{\omega} \chi_{yx}(\omega)$$
(11)

$$\sigma_{yx}^{SH}(\omega) = \frac{e}{4m} \chi_{yy}(\omega) + \frac{i e \Delta}{2m\omega} \chi_{yx}(\omega)$$
(12)  

$$\Sigma_{y}(\omega) = \chi_{yy}(\omega) \qquad (12)$$

$$\chi_{yy}(\omega) = \chi_{yx}(\omega)$$

ذاتی هال غیر عادی و اسپینی بدون برهمکنش، توابع پاسخ اسپین-اسپین بدون برهمکنش را در معادلات (11) و (12) جایگذاری میکنیم.

نتايج

در این بخش رسانندگی هال غیر عادی و اسپینی را رژیمهای تک نواری و دو نواری بررسی میکنیم. در رژیم تک نواری انرژی فرمی پایین تر از کف نوار با انرژی بالا ( $\Delta > _{F}$ ) و در رژیم دو نواری بالاتر از کف این نوار ( $\Delta < _{F}$ ) قرار دارد. رژیم تک نواری در حالت کلی دو ناحیه دارد: در ناحیه اول، انرژی فرمی در هر زاویه در یک نقطه نمودار پاشندگی را قطع میکند. در ناحیه دوم انرژی فرمی در هر زاویه در دو نقطه نمودار پاشندگی را قطع میکند. در اینجا رسانندگیهای ایستایی هال غیرعادی و اسپینی را در رژیم دو نواری و ناحیه اول رژیم تک نواری برای انرژیهای فرمی مثبت نواری و ناحیه اول رژیم تک نواری برای انرژیهای فرمی مثبت

برای محاسبه رسانندگیهای با برهمکنش به توابع پاسخ اسپین-اسپین با برهمکنش نیاز است. طبق رابطه(6)، توابع پاسخ با برهم-کنش را میتوان برحسب توابع بدون برهمکنش به دست آورد. بنابراین باید توابع پاسخ بدون برهمکنش سیستم محاسبه شوند. تابع پاسخ اسپین-اسپین بدون برهمکنش رژیم دو نواری در مرجع [2] به دست آمده است. در اینجا ما نتایج تحلیلی توابع پاسخ اسپینی را صرفا برای ناحیه اول رژیم تک نواری، که قبلا گزارش نشدهاند، ذکر میکنیم. در ناحیه اول رژیم تک نواری توابع پاسخ اسپین اسپین بدون برهمکنش ایستایی برابرند با

$$\chi^{0}_{yy}(\omega) = -\frac{m(\bar{\omega}_2 - \bar{\omega}_1)}{4 \pi \alpha} \left( 1 + \frac{4 \,\delta^2}{\bar{\omega}_2 \,\bar{\omega}_1} \right) \tag{13}$$

$$\chi_{yx}^{0}(\omega) = -\frac{i\,\delta\,\overline{\omega}}{\pi\,\alpha} \left(\frac{\overline{\omega}_{2} - \overline{\omega}_{1}}{\overline{\omega}_{2}\,\overline{\omega}_{1}}\right) \tag{14}$$

که  $\Delta = \sqrt{2m\alpha^2/\varepsilon_F}$  و  $\delta = \Delta/\sqrt{2m\alpha^2\varepsilon_F}$ . همچنین  $\Delta = \sqrt{2m\alpha^2/\varepsilon_F}$  و  $\delta = \Delta/\sqrt{2m\alpha^2\varepsilon_F}$  همچنین  $\Delta = 2\delta$   $\Delta = 1$   $\omega_1 = 2\delta$   $\Delta = 2\delta$   $\Delta = 1$   $\Delta = 1$  $\Delta$ 



$$\sigma_{yx}^{AH} \left[ \frac{e^2}{4\pi} \right] = \frac{1}{\Gamma(0,u)} \left( 1 - \frac{2\delta}{\sqrt{4(1+\delta^2) + \alpha^2} + \alpha} \right) \quad (15)$$

$$\sigma_{yx}^{SH} \left[ -\frac{e}{8\pi} \right] = \frac{\overline{\omega}_2 - \overline{\omega}_1}{2 \, \alpha \, \Gamma(0, u)} \left[ \left( 1 + \frac{4 \, \delta^2}{\overline{\omega}_1 \, \overline{\omega}_2} \right) \left( 1 - \frac{(\overline{\omega}_2 - \overline{\omega}_1)}{4 \, \alpha} \right) \left( 1 + \frac{4 \, \delta^2}{\overline{\omega}_1 \, \overline{\omega}_2} \right) - \frac{8 \, \delta^2}{\overline{\omega}_1 \, \overline{\omega}_2} \right]$$
(16)

که  $wU/2\pi$  است. شرط رژیم تک نواری برای انرژی های فرمی مثبت  $(\Delta > \epsilon_F < \Delta)$  معادل  $1 < \delta \alpha$  و شرط رژیم دو نواری  $\Delta < \epsilon_F > \Delta$  معادل  $1 > \delta \alpha$  است. بنابراین برای  $2 = \alpha$  به ازای  $\delta < 0.5 < \delta$  معادل  $1 > \delta \alpha$  است. بنابراین برای  $2 = \alpha$  به رژیم تک نواری قرار دارد. در شکل 1 رسانندگی ایستایی ذاتی هال رژیم تک نواری قرار دارد. در شکل 1 رسانندگی ایستایی ذاتی هال غیر عادی برحسب  $\delta$  برای مقادیر مختلف u رسانندگی هال غیر عادی نشان می دهد در هر دو رژیم با افزایش u رسانندگی هال غیر عادی افزایش می یابد. همچنین مشاهده می کنیم که رسانندگی هال غیر عادی با افزایش  $\delta$  در رژیم تک نواری افزایش و در رژیم دو نواری کاهش می یابد. طبق رابطه  $\frac{2\pi}{2m\alpha^2} \delta$  برای گاف ثابت، افزایش مقدار  $\delta$  معادل کاهش انرژی فرمی یا شدت جفت شدگی اسپین-مدار راشبا است.



شکل 1 : رسانندگی ایستایی ذاتی هال غیرعادی بر حسب پارامتر گاف  $\delta$  برای  $\alpha = 2.0$  و مقدارهای مختلف u. خط عمودی مرز بین ناحیه دو نواری (گافهای کوچک) و تک نواری (گافهای بزرگتر) را مشخص می کند. در شکل 2 رسانندگی ایستایی ذاتی هال اسپینی بر حسب  $\delta$  رسم شده است. در هر دو رژیم، رسانندگی هال اسپینی با افزایش  $\delta$ کاهش مییابد. اما اثر u در دو رژیم متفاوت است. در رژیم دو نواری افزایش u باعث افزایش رسانندگی اسپین هال می شود

درحالیکه در رژیم تک نواری افزایش u باعث کاهش رسانندگی اسیین هال است.



شکل2 : رسانندگی ایستایی ذاتی هال اسپینی بر حسب پارامتر گاف  $\delta$  برای lpha و مقدارهای مختلف a خط عمودی مرز بین ناحیه دو نواری lpha = 2.0 (گافهای کوچک) و تک نواری (گافهای بزرگتر) را مشخص می کند.

#### نتيجه گيري

در این مقاله، رسانندگیهای ذاتی هال غیر عادی و هال اسپینی را در گاز الکترونی دوبعدی مغناطیسی با جفت شدگی اسپین-مدار راشبا بررسی کردیم. نشان دادیم که این رسانندگیها در حد تمیز یا حد فرکانسهای بالا بر حسب توابع پاسخ اسپین-اسپین به دست میآیند. توابع پاسخ اسپین-اسپین با برهمکنش را در تقریب هابارد محاسبه کردیم. نشان دادیم که افزایش برهمکنش الکترون-الکترون باعث افزایش رسانندگی هال غیرعادی در رژیمهای تک نواری و هال غیرعادی در رژیم دو نواری و باعث کاهش آن در رژیم تک نواری میشود. افزایش برهمکنش باعث افزایش رسانندگی اسپینی در رژیم دو نواری و باعث کاهش آن در رژیم تک میشود. در هر دو زواری و باعث کاهش آن دررژیم تک نواری میشود. در هر دو رژیم با افزایش δ رسانندگی هال میشود. در هر دو رژیم با افزایش δ رسانندگی هال اسپینی کاهش می یابد. همچنین در اینجا یک تغییر علامت در اسپین هال مشاهده میکنیم.

مرجعها

M.Mir, S. H. Abedinpour, Phys. Rev. B 106, L201102 (2022)
 M.Mir, S. H. Abedinpour, Phys. Rev. B 96, 245110 (2017).





مقدمه

## سنتز ساختارهای بلوری تتراپاد ZnO به روش اکسیداسیون حرارتی پودر روی و تاثیر فرایند

پیش آسیا بر مورفولوژی

رضائی، فاطمه؛ کاملی، پرویز؛ رنجبر، مهدی دانشکاره فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان ۸۲۱۱۱–۸٤۵۵ پست الکترونیکی: s.rezaei@ph.iut.ac.ir

#### چکیدہ

در این مقاله با استفاده از یک روش سریع، ارزان و مقرون به صرفه بر اساس اکسیداسیون حرارتی پودر روی، ساختارهای منظم اکسیدروی را به شکل تتراپاد سنتز شد. در این پژوهش فرایند اکسیداسیون همراه با یک فرایند پیشآسیا در زمان های آسیای ۳، ۳ و ۱۰ ساعت انجام و تاثیر آسیا کردن بر ساختار بلوری بدست آمده بررسی شد. نتایج نشان داد که زمان آسیا و دمای پخت میتواند شکل ذرات بدست آمده را کنترل کند. با استفاده از آنالیز FESEM مشاهده شد که نانوذرات اکسیدروی با مورفولوژی تتراپاد رشد کردهاند و با تغییرات دما و سایش پودر اولیه نتایج بهبود مییابد.

واژه های کلیدی: نیمرسانا، نانوذرات اکسید روی (ZnO)، بازیخت حرارتی ( thermal annealing )، تترایاد

# Synthesis of zinc oxide (ZnO) tetrapod crystal structures by thermal oxidation method of zinc powder and the effect of ball-milling process on morphology

#### Rezaei, fatemeh; kameli, parviz; Ranjbar, Mehdi

Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan 84156-83111

#### Abstract

In this article, using a fast, cheap and cost-effective method based on the thermal oxidation of zinc powder, regular structures of zinc oxide in the form of tetrapod were synthesized. In this study, the oxidation process was performed along with a pre-treatment process (milling times of 3, 6, and 10 hours). Then the effect of grinding on the obtained crystal structure was investigated. The results showed that milling time and baking temperature can control the shape of the obtained particles. Using FESEM analysis, it was observed that zinc oxide nanoparticles have grown with tetrapod morphology, and the results improved with temperature changes and wear of the initial powder.

Keywords: Semiconductor, zinc oxide nanoparticles (ZnO), thermal annealing, tetrapod

علاوه بر خصوصیات ذاتی ماده، مورفولوژی و اندازهی ذرات در بروز خصوصیات فیزیکی و شیمیایی جدید در کاربردهای مختلف مؤثر است که منجر به بروز تفاوتهای آشکاری با حالتهای میکرومتری می شود [٤].

نانوساختارهای ZnO دارای مورفولوژیهای مختلفی از جمله پودرها، سیمها، کمربندها، گلها، میلهها و تتراپادها میباشند. در میان مورفولوژیهای متنوع، تتراپادها یک مورفولوژی خاص با چهار پای برآمده از مرکز هستند. تتراپادهای ZnO به دلیل استخراج و انتقال خوب الکترون که ناشی از مورفولوژی ذرات میباشد، کاربردهای زیادی در زمینهی نیم رسانای اکسیدروی ZnO با گاف نواری مستقیم و پهن به اندازه ۳.۳۷eV، داشتن انرژی پیوند بالای اکسیتونها به اندازه ۲۰MeV، رشد آسان با انواع نانوساختارهای مختلف، مقاومت در برابر تشعشعات ذرات، هزینه ساخت پایین، غیرسمی بودن، سازگاری با آلایشهای مختلف و تحرک بالای الکترونها همواره گزینهی مناسبی برای طیف گستردهای از کاربردها از جمله مهندسی پزشکی، حفاظت از محیطزیست، تصفیهی آب، وسایل الکترونیکی نانو، فتوکاتالیست، دیودهای نشر نور، حسگرهای UV، حسگرهای گازی و سلولهای خورشیدی میباشد [۳-۱].

دستگاههای فتوولتائیک و دستگاههای تبدیل انرژی دارند [۵]. در چندین پژوهش نشان داده شده است که مورفولوژی نهایی، وابسته به روش سنتز ماده و پارامترهای مؤثر در آن میباشد [۹– ٦]. درسالهای اخیر، نانو بلورهای ZnO به طور مؤثری از طریق تکنیکهای مختلفی چون رسوب الکتریکی، تەنشینی و روشهای هیدروترمال (گرمایی)، همرسوبی، سلژل، روش شعله و ... تهیه شدهاند [۱۰].

در این پژوهش با انتخاب روش اکسیداسیون حرارتی، نانوساختارهای اکسیدروی با مورفولوژی تتراپاد سنتز شد و با تغيير پارامتر دما و آسيا کردن پودر روی به منظور ايجاد پودر یکنواخت، اثر آن بر اندازه و مورفولوژی ذرات بررسی شد.

#### روش ساخت نمونهها

روش ساخت نمونهها در این پژوهش، روش اکسیداسیون حرارتی می باشد. در ابتدا پودر Zn با خلوص ۹۵ درصد، توسط ترازویی با دقت ۰٫۱ میلیگرم توزین شد. پودر توزینشده به کروزهای با قطر cm انتقال یافته و پس از ایجاد شیارهایی روی سطح پودر، به کورهای که تا دمای مورد نظر گرم شده است انتقال مییابد. پودر روی فلزی (Zn) در دماها و زمانهای آسیای مختلف مطابق جدول ۱ ساخته شد. نمونه ها بر اساس دما و زمان آسیا (مطابق جدول۱) نامگذاری شدند. پس از عملیات پخت، پودری نرم و سفیدرنگ حاصل می شود. پودر بهدست آمده در دمای محیط سرد شده و به نانوتیوپ منتقل میشود.

ساخت نمونهها	۱: شرايط	جدول
--------------	----------	------

نام نمونه						
زمان آسيا						
۱.	٦	٣	*			
<b>S</b> <sub>10-900</sub>	<b>S</b> <sub>6-900</sub>	S <sub>3-900</sub>	<b>S</b> <sub>0-900</sub>	۹۰۰° C	دمای	
<b>S</b> <sub>10-950</sub>	<b>S</b> 6-950	S <sub>3-950</sub>	<b>S</b> <sub>0-950</sub>	۹0°° C	پخت	

بحث و بررسی

یس از سنتز نمونه های مختلف که در جدول ۱ به آن ها اشاره شده است، به منظور تعیین ساختار بلوری نمونههای سنتز شده از آنالیز XRD استفاده شد (نمونه **510-950**). طبق نتایج ساختار بلوری (شکل۲) فاز بدست آمده مطابق با کارت استاندارد مربوط به ترکیب اکسیدروی با ساختار ورتزیت می باشد که نشان دهنده تشکیل موفقیتآمیز فاز مورد نظر است. همانطور که در طیف XRD مشاهده می شود قلهی [۱۰۱] نسبت به سایر قلهها شدت بیشتری دارد که نشاندهنده رشد ترجیحی ذرات در راستای مورد نظر است. علاوه براین، نسبت سیگنال به نویز در طیف XRD بسیار بالا است که نشاندهنده نانوذرات با ویژگی بلوری بالا مىباشد. هچنين پهناى باريك قلەها نشاندهنده ابعاد بزرگ بلورها میباشد که با نتایج تصویربرداری میکروسکوپی که در شکل بعدی نشان داده شده است مطابقت دارد (شکل۲).

برای بررسی مورفولوژی ذرات اکسیدروی از تصویربرداری FESEM استفاده شد که در شکل۲ برای چهار نمونه مختلف (S10-950، S3-950، S3-950) نشان داده شده است. در شکل a دما °۹۵۰° و مدت زمان آسیا، • ساعت می باشد. تمام اکسیداسیون،ها در مدت زمان ٤٥ دقیقه صورت گرفته است. سنتز اکسیدروی طبق روش بازپخت گرمایی منجر به رشد ذرات اکسید روی در ابعاد میکرو و با مورفولوژی تتراپاد می شود. در بررسی موفولوژی ذرات با استفاده از تصاویر SEM مربوط به نمونهی آسیا نشده و نمونههای آسیا شده، به وضوح مشاهده میشود که با افزایش زمان سایش، ترکیب یکنواختتری حاصل شده و تتراپادهای منظمتری رشد یافتهاند. هچنین مشاهده می شود که اندازه تتراپادها به دمای سنتز وابسته بوده و نمونههای پختشده با دمای C°۹۰۰، در مقایسه با دمای پخت C°۹۰۰، اندازه بزرگتری دارند. در عملیات یخت، بدیهی است که در دماهای بالا، انرژی ذرات بالاتر بوده، اتمها در هم نفوذ میکنند و در نتیجه اندازه دانه بزرگتر میشود. اما در اینجا با مکانیزم متفاوتی مواجه هستیم. زمانی که پودر روی در دمای بالا قرار می گیرد، ماده به صورت ناگهانی تبخیر شده و با اکسیژن هوا اکسید میشود. در این صورت هر چه دما بالاتر باشد، سرعت تبخیر بیشتر بوده و دانهها فرصت رشد پیدا نمیکنند. در دمای پایینتر، سرعت تبخیر کندتر



شود، این یکنواختی باعث می شود حین عملیات رشد، تتراپادهای ایجاد شده توزیع همگن و یکنواخت تری داشته باشند. زیرا در پودر اولیه توزیع ذرات یکنواخت نیست و ابعاد ذرات در محدوده ۱ تا ۱۰ میکرومتر می باشد. تغییر دمای پخت از 2°۹۰۰ به 2°۹۰۰ باعث کاهش اندازه تتراپادها می شود. در این پژوهش نمونهی پخت شده با دمای 2°۹۰۰ در مدت زمان ٤٥ دقیقه و زمان سایش ۱۰ ساعت، نمونهی بهینه می باشد. به طور خلاصه نشان داده شد که با یک روش سریع و ارزان قیمت می توان نانوذرات اکسیدروی به شکل تتراپاد را بدست آورد که می تواند برای کابردهای

مرجعها

[1] Yavaş, Ahmet, Saadet Güler, and Mustafa Erol. "Growth of ZnO nanoflowers: effects of anodization time and substrate roughness on structural, morphological, and wetting properties." *Journal of the Australian Ceramic Society* 56, no. 3 (2020): 995-1003.

[Y] Franco, Mariane A., Patrick P. Conti, Rafaela S. Andre, and Daniel S. Correa. "A review on chemiresistive ZnO gas sensors." *Sensors and Actuators Reports* (2022): 100100.

[<sup>r</sup>] Mishra, Yogendra Kumar, Gaurav Modi, Vasilii Cretu, Vasile Postica, Oleg Lupan, Tim Reimer, Ingo Paulowicz et al. "Direct growth of freestanding ZnO tetrapod networks for multifunctional applications in photocatalysis, UV photodetection, and gas sensing." *ACS applied materials & interfaces* 7, no. 26 (2015): 14303-14316.

[4] Kumar, S. Girish, and KSR Koteswara Rao. "Zinc oxide based photocatalysis: tailoring surface-bulk structure and related interfacial charge carrier dynamics for better environmental applications." *Rsc Advances* 5, no. 5 (2015): 3306-3351.

[•] Lee, Geun-Hyoung. "Effect of annealing temperature on the morphology and optical properties of ZnO tetrapods grown by a thermal evaporation technique." *Ceramics International* 42, no. 13 (2016): 14452-14455.

[<sup>1</sup>] Cheng, I-Kai, Chun-Yu Lin, and Fu-Ming Pan. "Gas sensing behavior of ZnO toward H2 at temperatures below 300° C and its dependence on humidity and Pt-decoration." *Applied Surface Science* 541 (2021): 148551.

[Y] Wang, Xudong, Hairong Li, Dandan Huang, Yongchang Wang, Wenhao Fan, Lina Cai, Wenjie Wang, Yawen Chen, Genliang Han, and Yuzhe Song. "Effect of Co-doping on the performance of nanosheet-like ZnO ethanol gas sensor." *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* 32, no. 22 (2021): 26529-26538.

*Electronics* 32, no. 22 (2021): 26529-26538. [^] Kamble, V. S., et al. "Studies on structural, spectral and morphological properties of co-precipitation derived Co-doped ZnO nanocapsules for NO2 sensing applications." Journal of Materials Science: Materials in Electronics 32.22 (2021): 26503-26519

[<sup>4</sup>] Kumar, Sonu, R. D. Kaushik, and L. P. Purohit. "Novel ZnO tetrapodreduced graphene oxide nanocomposites for enhanced photocatalytic degradation of phenolic compounds and MB dye." *Journal of Molecular Liquids* 327 (2021): 114814.

[1.] Jeon, Jun-Young, Sang-Joon Park, and Tae-Jun Ha. "Functionalization of zinc oxide nanoflowers with palladium nanoparticles via microwave absorption for room temperature-operating hydrogen gas sensors in the ppb level." ACS Applied Materials & Interfaces 13, no. 21 (2021): 25082-25091.

> Thermal annealing - ' 97\_77...٤٥١ - '

بوده و ذرات تبخیرشده فرصت بیشتری برای اتصال به هم دارند که منجر به بزرگتر شدن اندازه تتراپادها می شود.



شکل ۱: XRD مربوط به نمونه S10-950



شكل ۲: a) تصويرنمونه **50-950** b) تصويرنمونه c S3-900) تصويرنمونه S3-950 d) تصويرنمونه S10-950.

## نتيجه گيري

با اکسیداسیون حرارتی پودر روی، ساختارهای بلوری اکسیدروی با مورفولوژی تتراپاد بدست آمد. دلیل فیزیکی این امر در دست بررسی میباشد. نشان داده شد که آسیا کردن قبل از اکسیداسیون حرارتی تاثیر به سزایی در شکل ذرات تولید شده دارد به گونهای که افزایش زمان آسیا منجر به تشکیل ساختارهای تتراپاد منظمتری میشود. عملیات سایش باعث میشود پودر یکنواختتری ایجاد



توضیح: با توجه به اینکه تصاویر گرفته شده در آنالیز SEM در زمان واحد صورت نگرفته، مقیاس آنها یکسان نیست.



## **KNiPO4 ساخت و بررسی ویژگیهای ساختاری و دیالکتریکی ترکیب چندفروئی KNiPO4** بوالخیری ، فاطمه<sup>۱\*</sup>؛ جعفری فشارکی ، مرجانه<sup>۲</sup>؛ احمدوند، حسین<sup>۱</sup> <sup>ا</sup>دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان <sup>۲</sup>گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، تهران

#### چکیدہ

در این پژوهش، ترکیب چندفرونی KNiPO4 به روش شیمیایی مرطوب ساخته شد. ساختار و فاز نمونه توسط الگوی پراش اشعهٔ ایکس (XRD) بررسی شد. به منظور بررسی تأثیر دما در ساختار بلوری ماده طیف پراش اشعه ایکس سینکروترون دما بالا انجام شد. نمودار کانتور الگوهای XRD به ترتیب دو گذار در دماهای ۲۰ ۴۹۰ ۲۵ و ۲۵ ۲۵ ۲۵ در حین فرایند گرم شدن و دو گذار در دماهای ۲۵ Tc= ۲۱ و ۲۵ Evi حین فرایند سرد شدن نشان میدهد. همچنین تحلیل ریتولد نمونه KNiPO4 دلالت بر ساختار بلوری Ira21 در دمای ۲۵ ۲۰ دارد. رفتار ظرفیت خازن بر حسب دما به منظور بررسی گذارهای فاز فروالکتریکی ماده مورد بررسی قرار گرفت و یک گذار در دمای ۲۲ Tc= ۵۷ دیده می شود که مرتبط با گذار از ساختار بلوری قطبی به غیر قطبی (گروه فضایی Pnma) در دماهای بالا است.

واژه های کلیدی: ویژگی های ساختاری، دی الکتریکی، چند فروئی، KNiPO4.

#### Preparation and Investigation of Structural and Dielectric Properties of KNiPO<sub>4</sub> Multiferroic Bolkheyri, Fatemeh<sup>1\*</sup>; Jafari Fesharaki, Marjaneh<sup>2</sup>; Ahmadvand, Hossein<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan <sup>2</sup>Department of Physics, Payam Noor University, Tehran

#### Abstract

In this study, multiferroic compound of KNiPO<sub>4</sub> was prepared by wet chemical method. The structure and phase formation of sample was analyzed by x-ray diffraction (XRD). In order to investigate the effect of temperature on the crystal structure of the compound, high temperature synchrotron XRD was performed. The contour diagram of XRD patterns show two transitions at  $T_0=490$ °C and  $T_c=597$ °C during the heating process and two transitions at  $T_c=596$ °C and  $T_0=471$ °C during the cooling process, respectively. Also, Rietveld analysis of KNiPO<sub>4</sub> sample indicates the crystal structure of Pna21 at 20 °C. The temperature dependence of capacitance was investigated to study the ferroelectric phase transitions which shows a transition at Tc=575 °C which is attributed to Pnma space group at high temperatures.

Keywords: Structural Properties, Dielectric, Multiferroic, KNiPO4.

PACS No. 70, 75, 77.

مغناطیسی و فروالکتریکی را می توان ملاحظه نمود. این مواد در دو نوع تک فاز و کامپوزیتی هستند [۱، ۲]. در دهههای گذشته مواد مغناطوالکتریک مورد مطالعه قرار گرفتند و با توجه به کاربرد و گسترش مواد با نظمهای مغناطیسی و فروالکتریکی در خازنهای

موادی که به طور همزمان دو یا چند نظم را در ساختار خود نشان میدهند را مواد چند فروئی مینامند. مواد مغناطوالکتریک نوعی از مواد چند فروئی هستند که در آنها جفتشدگی بین دو نظم

مقدمه



فروالکتریک، مولدها، حسگرهای مغناطیسی و غیره، می توان طیف گستردهای از کاربردها با حداقل دو مرتبه جفت شدگی را برای توسعه فناوری در گام بعدی در نظر گرفت [۱، ۲]. ترکیب KNiPO4 مغناطوالکتریک نوع تک فاز از گروه اورتوروفسفاتها است که دارای ساختار بلوری ارتورومبیک با گروه فضایی قطبی Pna2<sub>1</sub> میباشد که در آن Ni در جایگاه پنجوجهی و P در جایگاه چهار وجهی قرار دارد [۳]. این ترکیب در دماهای بالا ۲<sub>C</sub>=۵۸۵ °C گروه فضایی Pnma دارد [٤] و زیر دمای دارای نظم پادفرومغناطیس می باشد. همچنین با شکست  $T_N$ =۲۵K تقارن فضایی نظم فروالکتریسته در این ماده به وجود می آید [۳]. اندازه گیری ODSC، میکروسکوپ نوری پلاریزه و تکنیکهای یراش اشعه X توسط Lujan و همکاران دو گذار در T<sub>0</sub>= ٤٩١ °C و C° ۵۸۵ °C و T<sub>0</sub>= ٤٩١ را نشان می دهد. گذار فاز به Pnma را نشان می دهد [٤]. Lujan و همکاران ثابتهای شبکه برای این نمونه در دمای C °C را b=٩/٢٥٦٥Å ،a=٨/٦٣٣٣Å و c=٤/٩٠٦٤Å، دمای ۲٦٠°C، دمای c=٤/٩٠٦٤Å و c=٤/٩٠٩٦Å برآورد کردند [۳،٥]. همچنین ثابت شبکه در دمای ۳۰ °C را b=٩/٢٥٥Å ،a=٨/٧٠٣Å و c=٥/١٤٠٣Å کردند و پارامترها را به گروه فضایی Pnma نسبت دادند [٥]. در تحقیق حاضر ویژگی های ساختاری و دی الکتریکی ترکیب KNiPO<sub>4</sub> مورد بررسی قرار گرفته است.

#### روشهای تجربی

مواد اولیه مورد استفاده جهت ساخت ترکیب KNiPO4 به روش شیمیایی مرطوب به ترتیب عبارتند از: Ni(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>.6H<sub>2</sub>O از شیمیایی مرطوب به ترتیب عبارتند از:  $C_2H_3KO_2$ ، KO<sub>4</sub>P از  $C_2H_3KO_2$ ، H<sub>6</sub>NO<sub>4</sub>P برای تهیه g ۷ از این ترکیب، g ۱۰/٤٦ از H<sub>6</sub>NO<sub>4</sub>D بر اساس استوکیومتری مشخص توزین و به طور جداگانه در حداقل آب بدون یون حل شدند و به طور پیوسته روی همزن مغناطیسی در دمای  $^{\circ}$  ۰۰۰ قرار گرفت تا آب محلول کاملاً، تبخیر شد. سپس پودر حاصل درون هاون دستی به مدت ۱۰ دقیقه ساییده شد. سپس ترکیب حاصل در مراحل مختلف تحت عملیات حرارتدهی در کوره

الکتریکی با قابلیت برنامهریزی قرار گرفت. در نهایت فاز ترکیب مورد نظر در دمای ℃ ۷۸۰ تشکیل شد. بررسی ساختاری و High Temperature Synchrotron در نصو سوئیس – نروژ (BM01) در سینکروترون XRD Measurement در خط پرتو سوئیس – نروژ (BM01) در سینکروترون ESRF (فرانسه) در بازه دمایی ℃ ۲۰ تا ℃ ۷۰۰ با گام ℃ ۲ انجام شد. با استفاده از نرم افزار Mag2Pol و Medved مشخصههای ساختاری نمونهها بررسی شد. وابستگی دمایی ظرفیت خازن با دستگاه LCR متر در بسامد MHz اندازه گیری شد.

نتايج و بحث

شکل ۱ تحلیل ریتولد مربوط به ساختار بلوری Pna2<sub>1</sub> در دمای ۲۰ °C را نشان می دهد.



در دمای<sup>°</sup> ۲۰ با نرم افزار Mag2Pol
شکل۲ الگوهای پراش اشعه ایکس (XRD) نمونه KNiPO4 را حین فرایند گرم شدن و سرد شدن در دماهای مختلف نشان می دهد.



شکل۲. الگوی XRD نمونه KNiPO4 در دماهای مختلف حین فرایند گرم شدن ( پیکان قرمز) و سرد شدن(پیکان آبی).

. شکل ۳، نمودار کانتور الگوهای XRD دما بالا نمونه KNiPO4 را حین فرایند گرم شدن و سرد شدن نشان میدهد. مطابق شکل، دو گذار در دماهای C° To=۵۹ و C° ۲۰۵ه=C در حین فرایند گرم شدن و دو گذار در دماهای C° ۲۰۵ه=C و C°۲۰۵ حین فرایند سرد شدن مشاهده میشود. گذار T0 به دلیل ناهنجاری بلوری رخ می دهد که در آن جایگاه نیکل از جایگاه پنج وجهی به چهار وجهی تقلیل مییابد. این گذار دما پایین دارای پسماند حرارتی است. این پسماند نشان میدهد که گذار دما پایین یک گذار مرتبه اول است. از طرفی گذار دما بالا در ۵۹۷ بدون پسماند



شکل۳. نمودار کانتور نمونه KNiPO4 حین فرایند گرم شدن و سرد شدن.

نتایج مربوط به مشخصات ساختاری برای نمونه KNiPO4 مربوط به دماهای گذار با استفاده از تحلیل ریتولد در نرم افزار Mag2Pol محاسبه و در جدول ۱ نشان داده شده است.

جدول ۱. مشخصات ساختاری محاسبه شده KNiPO4 در دماهای مختلف.

فرايند	T(°C)	a (Å)	b (Å)	c (Å)	R <sub>F</sub>
گرم	۲.	٨/٦.٣٩٧	9/788.0	٤/٨٩٤٩١	٧/٢٠
ش <i>د</i> ن	٤٩٠	٨/٦٥٦٠١	9/19790	٤/٩٨٧٩٧	10/17
	٥٩٧	٨/••٦٥٣	٨/٥٤٢٧٣	٤/٧١٠٤٠	10/17
سرد	٥٩٦	٨/٩٢٣٦١	9/01157	0/70723	۳۹/۷۹
شدن	٤٧١	٨/٥٥٢٢١	٩/٢•٧٨٩	٤/٩٢٦٩١	10/11

ثابتهای شبکه گزارش شده در جدول ۱ در دمای ℃ ۲۰ با گروه فضایی Pna21 همخوانی دارد که مطابق نتایج گزارش شده درمرجع [۳] میباشد .

نمودار ظرفیت خازن بر حسب دما برای نمونه KNiPO4 در بسامد MHz در شکل ۵ نشان داده شده است. مطابق شکل یک گذار در دمای  $2^{\circ}$  ۵۷۵= $T_c$  (حین گرم شدن نمونه) و (حین سرد شدن نمونه) مشاهده می شود. این گذار معادل گذار T (دیده شده در شکل ۳) است و مربوط به گذار از ساختار بلوری قطبی به ساختار بلوری غیر قطبی Pnma در دماهای بالا می باشد. همچنین یک گذار در دمای  $2^{\circ}$  ۹۹3= $T_c$  در فرایند گرم شدن مشاهده می شود که به گذار جایگاه بلوری نیکل نسبت داده می شود این گذار مجدداً حین فرایند سرد شدن در دمای  $2^{\circ}$  ۹۸





مرجع ها

[1] A. Cano, D. Meier, and M. Trassin, eds., Multiferroics: Fundamentals and Applications (De Gruyter, 2021).

[2] Wang, Junling. Multiferroic materials: Properties, techniques, and applications. CRC Press, 2016.

[3] Fischer, Peter, et al. "Crystal structure and magnetic ordering in magnetoelectric KNiPO4 investigated by means of X-ray and neutron diffraction." Ferroelectrics 162.1 (1994): 37-44.

[4] Lujan, M., H. Schmid, and P. Tissot. "Phase transitions in ferroic crystals of KMPO 4 (M= Fe 2+, Co 2+, Ni 2+) studied by ODSC." Journal of Thermal Analysis and Calorimetry 48.3 (1997): 597-610.

[5] Luján, Marcos, Jean-Pierre Rivera, and Hans Schmid. "Structural studies of KNiPO4 at high temperature." Ferroelectrics 185.1 (1996): 59-62.

### فرایند گرم شدن و سرد شدن یک پسماند حرارتی را می توان مشاهده کرد و در تطابق با نتایج دیگران است [٤،٣].



#### نتيجه گيري

ماده تک فاز KNiPO4 با گروه فضایی غیر قطبی Pna2<sub>1</sub> به روش شیمیایی مرطوب ساخته شد. طیف پراش اشعه ایکس دما بالای در خط پرتو سوئیس – نروژ (BM01) در سینکروترون ESRF از نمونه گرفته شد و تغییرات الگوی XRD به همراه ثابت های شبکه در دمای مختلف بررسی شد. گذارهای ساختاری دما بالا مشاهده شد. همچنین ساختار آن در دمای اتاق استخراج شد و با اندازه گیری ظرفیت خازن بر حسب دما گذار فاز بلوری نمونه از حالت قطبی به حالت غیر قطبی در دمای  $^\circ$  ۵۷ه=Tc مشاهده شد.

#### تشکر و قدردانی

نویسندگان مقاله از همکاری دکتر Henrik M. Ronnow از دانشگاه EPFL سوییس جهت همکاری در این پروژه و فراهم کردن اندازه گیری پراش اشعه ایکس سینکروترون قدردانی به عمل می آورند.



## خواص الکتریکی و مغناطیسی نانونوار زیگزاگ آنتیمونن در حضور ناخالصی آهن در موقعیت

های مختلف

حسن پور کاشانی ، شراره ؛ بروستانی، جمال؛ مشگین قلم، بهار گروه فیزیک ماده چگال، دانشکاه فیزیک، دانشگاه تبریز، تبریز

### چکیدہ

تغییر موقعیت ناخالصی، خواص الکتریکی و مغناطیسی ساختار نانونوار آنتیمونن را تحت تاثیر قرار می دهد. در این مقاله، خواص الکتریکی (ساختار نواری و چگالی حالت) و مغناطیسی (قطبش اسپینی و گشتاور مغناطیسی) نانونوار زیگزاگ آنتیمونن را تحت تاثیر موقعیتهای مختلف اتم ناخالصی آهن، از مرکز تا لبه، مورد مطالعه قرار داده ایم. شکاف اسپینی نسبت به حالت بدون آلایش، افزایش داشته و گشتاور مغناطیسی، با تغییر موقعیت از مرکز به سمت لبه روند کاهشی داشته است.

واژه های کلیدی: آنتیمونن، نانونوار زیگزاگ آنتیمونن، گشتاور مغناطیسی، تئوری تابع چگالی.

# Electrical and magnetic properties of zigzag antimonene nanoribbons in the presence of Fe impurity atom in different positions

#### Hasanpour kashani, Sharareh; Barvestani, Jamal; Meshginqalam, Bahar

Department of Condensed Matter Physics, Faculty of Physics, University of Tabriz, Tabriz

#### Abstract

Changing the position of the impurity, affects the electrical and magnetic properties of the antimonene nanoribbon structure. In this article, we have studied the electronic (band structure and density of states) and magnetic (spin polarization and magnetic moment) properties of zigzag antimonene nanoribbons under the influence of different positions of Fe atom, from the center to the edge of nanoribbons. The spin gap has increased compared to the pristine structure and the magnetic moment has decreased with the change of position from the center to the edge.

Keywords: Antimonene, Zigzag antimonene nanoribbon, Magnetic moment, Density functional theory

PACS No. 68, 73, 75

دارد. این ماده جفتشدگی اسپین مدار قوی دارد و در اثر نازک شدن و تبدیل از حالت کپهای به تک لایه ساختار نواری تغییرات ناگهانی داشته و از نیمه فلز به نیمه هادی تغییر میکند<sup>[1]</sup>. محاسبات تئوری تابع چگالی نشان میدهد ساختار لانه زنبوری تک لایه آنتیمونن، دگر شکلهای مختلف دارد. از بین این دگرشکلها، آنهایی که از نظر تئوری و تجربی مورد بررسی قرار

مقدمه

آنتیمونن به عنوان یک ماده دوبعدی تک لایه در سالهای اخیر توجه زیادی را درحوزه مواد کم بعد به خود جلب کردهاست. آنتیمونن به دلیل داشتن خواص منحصر به فردی همانند گاف نواری عریض، تحرک الکترونی بالا و پایداری بیشتر، قدرت زیادی در میدانهای الکترونیکی، اپتوالکتریکی، ترموالکتریک و حسگرها



گفتهاند، فازهای آلفا و بتا نامیده میشوند. فاز آلفا ساختار چروکیده دارد در حالی که فاز بتا آنتیمونن ساختار خمیده داشته و در کمترین انرژی پیکربندی بوده و پایداری بیشتری دارد<sup>[2]</sup>. از اینرو ما ساختار نانونوار زیگزاگ آنتیمونن در فاز بتا را مورد بررسی قرار دادهایم. مواد فرومغناطیس به ویژه نیمه فلزهایی با قطبش اسپینی کاربرد قابل توجهی در دستگاه های اسپینترونیک دارند. با این حال بیشتر مواد دو بعدی خاصیت مغناطیسی نداشته و این مانع استفاده آنها در دستگاه اسپینترونیک و یماند. برای همین اقای خاصیت مغناطیسی به مواد دوبعدی حائز اهمیت میباشد<sup>-3</sup>] آنیمونن، آرم چیر و زیگزاگ، به بررسی اثر ناخالصیهای مختلف مانند فلزات انتقالی در یک موقعیت خاص پرداختهاند، ما در این کار تاثیر موقعیتهای مختلف اتم آهن، از مرکز تا لبه، بر خواص مانند و ایر مونوار ویگزاگ آنتیمونن را مورد بررسی قرار دادهایم.

### روش محاسبات

برای طراحی ساختار نانونوار زیگزاگ آنتیمونن (ZSbNR) از نرم افزار شبیه سازی ATK استفاده شدهاست. روش محاسبات مبتنی بر تئوری تابع چگالی بوده و تابع همبستگی تبادل SGGA-PBE انتخاب شدهاست. نمونه برداری فضای k برای محاسبات الکتریکی و مغناطیسی ۱۰۰ × ۱×۱ و برای بهینه-سازی ۲۱ × ۱×۱ و انرژی آستانه ۲، ۱۰۰ ریدبرگ در نظر گرفته شدهاست. سلول واحد آنتیمونن دارای طول پیوند Å ۷۸/۲ و تاخوردگی Å ۱۰۰ [<sup>10]</sup> میباشد. ساختار نانونوار زیگزاگ با شکل ۱ ساختار نانونوار زیگزاگ آنتیمونن را نمایش میدهد که در شکل ۱ ساختار نانونوار زیگزاگ آنتیمونن را نمایش میدهد که در آن موقعیت اتم ناخالصی، به ترتیب از مرکز تا لبه نانونوار ماست.

Sampling mesh cut- off



شکل۱: ساختار نانونوار زیگزاگ آنتیمونن با عرض ۱۲ اتم از نمای بالا. اتم های هیدروژن و آنتیموان به ترتیب با رنگ سفید و بنفش مشخص شدهاند.

با توجه به اینکه شعاع اتمی ناخالصی آهن کوچکتر از شعاع اتمی Sb بوده و اندازه ساختارها محدود است، سیستم باید دارای کرنش باشد تا در موقعیت ناخالصی دوباره پیوند ایجاد کند. این کرنش باعث میشود که طول پیوند با ساختار خالص متفاوت باشد. در اتم آهن، همان طور که در شکل ۲ نشان داده شده است، طول پیوند در همسایگی موقعیت ناخالصی نسبت به حالت اولیه حدود Å ۲۰.۰ افزایش یافته است که منجر به تشکیل پیوند در موقعیت اتم آهن شده است. مقدار کاهش این پیوند ایجاد شده در محل اتم ناخالصی، حدود Å ٤.۰ بوده است.



شکل۲: ساختار نانونوار زیگزاگ آنتیمونن آلاییده با یک اتم آهن

برای بررسی تاثیر موقعیت اتم ناخالصی (آهن) بر خواص الکتریکی و مغناطیسی نانونوار زیگزاگ آنتیمونن، ساختار نواری، چگالیحالت، قطبش اسپینی و گشتاور مغناطیسی برای این ساختار محاسبه شده و نتایج با محاسبات ساختار بدون آلایش نانونوار

زیگزاگ آنتیمونن مقایسه شدهاست. ساختار نواری ZSbNR آلاییده با اتم آهن در موقعیتهای مختلف در شکل ۳ (الف-ت) آورده شدهاست. نمودار مشکی (قرمز) مربوط به اسپین در حالت بالا (پایین) می باشد. افزودن اتم آهن سبب جدایی اسپین و ایجاد عدم تقارن در حالت های اسپین بالا و پایین می شود. نوارهای ایجاد شده اضافی در داخل گاف نواری در شکل مشخص شده



شکل۳: ساختار نواری پیکربندی نانونوار زیگزاگ آنتیمونن آلایش یافته با یک اتم آهن در موقعیتهای مختلف الف) A ب) B پ) C ت) D

به همین ترتیب، چگالی حالت برای نانونوار زیگزاگ آنتیمونن آلاییده با اتم آهن در شکل ٤ آورده شدهاست. نمودار مشکی (قرمز) مربوط به اسپین در حالت بالا (پایین) بوده و خط چین در انرژی صفر، موقعیت انرژی فرمی را نمایش میدهد. با مقایسه شکلهای ۳ و٤ به این نتیجه میرسیم که خواص الکتریکی در

موقعیتهای B, A و C مشابه است و در مورد موقعیت D، به دلیل نزدیک بودن به لبه، تقارن شبکه لانه زنبوری ساختار آنتیمونن شکسته شده و رفتارمتفاوتی مشاهده میشود.



شکل ٤: چگالی حالت پیکربندی نانونوار زیگزاگ آنتیمونن آلایش یافته با یک اتم آهن در موقعیتهای مختلف الف) A ب) B پ) C ت) D

جهت مطالعه اثر جدایی اسپین، قطبش اسپینی و گشتاور مغناطیسی برای ساختارهای مورد نظر بررسی شده است. قطبش اسپینی به صورت  $M_{c} = \frac{N_{u} - N_{d}}{N_{u} + N_{d}} = Sp$  تعریف می شود که در آن صورت  $M_{c} = \frac{N_{u} - N_{d}}{N_{u} + N_{d}}$  تعریف می شود که در آن  $m_{u} + N_{d}$  و  $M_{s}$  به ترتیب چگالی حالت الکترونها در اسپین بالا و پایین را نمایش می دهد. مقدار قطبش اسپینی برای ساختار آلاییده با اتم آهن در موقعیت های A، B و C، ۱۰۰ درصد بدست آمده و اما در موقعیت D مقدار صفر را نشان می دهد. گشتاور مغناطیسی نیز به صورت D مقدار صفر را نشان می دهد. گشتاور مغناطیسی نیز به صورت M = m\_u-m\_d و M به ترتیب مربوط به تعداد الکترونها در اسپین بالا و پایین است. مقادیر گشتاور مغناطیسی برای موقعیتهای مختلف اتم آهن (A تا (A تا را) به ترتیب به این صورت می باشد: M = 1.2 م (D) به ترتیب به این صورت می باشد: M = 1.2



- Sh. Zhang, M. Xie, F. Li, Zh. Yan, Y. Li, E. Kan, W. Liu, Zh. Chen, H. Zeng. (2016). Semiconducting Group 15 Monolayers: A Broad Range of Band Gaps. *Angew. Chem*, **128**, 1698-1701.
- Z. Zhu, Z. H. Zhang, D. Wang, X. Q. Deng, Z. Q. Fan, G. P. Tang. (2015). Magnetic structure and magnetic transport. *The Royal Society of Chemistry*, 3, 9655-9663.
- R. Hu, Y.H. Li, Z. H. Zhang, Z. Q. Fan, L. Sun. (2019). O-Vacancyline defective Ti2CO2 nanoribbons. J. Mater. Chem. C, 7, 7745-7759.
- Sh. Ding,Y. Tian, Y. Li, H. Zhang, K. Zhou, J. Liu, L. Qin, X. Zhang, X. Qiu, H. Dong, D. Zhu, W. Hu (2019). Organic Single-Crystal Spintronics. ACS Nano, 13, 9491-9497.
- M. Zeng, L. Shen, M. Yang, Ch. Zhang, Y. Feng. (2011). Charge and spin transport in graphene-based heterostructure. *Appl. Phys. Lett*, 98, 1-5.
- J. Zeng, Ke. Chen, J. He, X. Zhang, Q. Sun. (2011). Edge Hydrogenation-Induced Spin-Filtering and Rectifying Behaviors. *American Chemical Society*, 115,25072-25076.
- D. Wang, Z. Zhang, Z. Zhu, B. Liang (2014). Magnetic structure and Magnetic transport Properties of Graphene. *Sientific Reports*, 4,1-7.
- 9. P. Lou. (2014). A New Kind of Edge-Modified Spin Semiconductor in Graphene. J. Phys. Chem. C, **118**,4475-4482.
- Sh.B Touski, M.P López-Sancho. (2021). Effects of vertical electric field and charged impurities on the spin-polarized transport of βantimonene armchair nanoribbons. *Physical Review B*, 103,1-7.

اسپین بالا و پایین، گشتاور مغناطیسی و قطبش اسپینی برای موقعیتهای A تا D اتم آهن در جدول ۱ آورده شدهاست.

جدول۱. مقادیر گشتاور مغناطیسی و قطبش اسپینی برای ساختار نانونوار زیگزاگ آنتیمونن آلاییده با اتم آهن در موقعیتهای مختلف

موقعيت	گشتاور	قطبش اسپيني
اتم	مغناطيسي	(/.)
ناخالصي	$(\mu_B)$	
Fe(A)	٣.٤٤٢	1
Fe(B)	٣.٣٦١	۱۰۰
Fe(C)	٣.٣١٩	1
Fe(D)	1.•11	*

نتایج فوق بیانگر تغییرات عمده در خواص اسپینی ساختار در همه موقعیتهای بررسی شده، نسبت به حالت بدون آلایش، می باشد. قطبش اسپینی جدایی اسپین را فقط در سطح فرمی توصیف می کند در حالیکه گشتاور مغناطیسی آن را در تمامی انرژی ها نشان می-دهد از این رو مقدار گشتاور مغناطیسی با تغییر موقعیت ناخالصی از مرکز به لبه نانونوار، کاهش یافتهاست.

#### نتيجه گيرى

در این مقاله تاثیر تغییر موقعیت ناخالصی اتم آهن از مرکز تا لبه، بر خواص الکتریکی و مغناطیسی ساختار نانونوار زیگزاگ آنتیمونن بررسی شدهاست. نتایج بررسی بیانگر این است که در موقعیت D نسبت به موقعیتهای دیگر، به دلیل نزدیک بودن به لبه، تقارن شبکه لانه زنبوری شکسته شده و رفتار متفاوتی دارد. به طوریکه با تغییر موقعیت از مرکز به لبه، گشتاور مغناطیسی روند کاهشی و شکاف اسپین بالا روند افزایشی داشته است. همجنین قطبش اسپینی در موقعیت D مقدار صفر داشته درحالیکه در سه موقعیت A، B و C مقدار ۱۰۰ درصد را نشان دادهاست.

مرجعه

 Zhang, S., Yan, Z., Li, Y., Chen, Z., Zeng, H., (2015) Atomically thin arsenene and antimonene: Semimetal-semiconductor and indirect-direct band-gap transitions. *Angew Chem. Int. Ed.*, 54, 3155-3158.





### خواص اپتيکی آلياژها با پهنای گاف کم (InAs<sub>x</sub>Sb<sub>1-x</sub>(x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1

نامجو ، شیرین<sup>۱</sup>؛ پوشنیگ، پیتر<sup>۲</sup> <sup>ا</sup>گروه فیزیک، دانشگاه لرستان ، خرم آباد <sup>۲</sup>موسسه فیزیک، دانشگاه گراتس، گراتس، اتریش

#### چکیدہ

بخش موهومی تابع دی الکتریک آلیاژهای (InAs<sub>x</sub>Sb<sub>1-x</sub>(x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1 با استفاده از نظریه تابعی چگالی و بکارگیری بسته محاسباتی Wien2k مورد بررسی قرار گرفته است. تابع دی الکتریک این آلیاژها با استفاده از تقریب فاز تصادفی و با بکارگیری دو تابعی تبادلی همبستگی mBJLDA و GGA(Wu-Cohen) مورد بررسی قرار گرفته است. تابع دی الکتریک این آلیاژها با استفاده از محاسبات ابتا به ساکن، تطابق بسیار خوبی را با نتایج تجربی در پیش بینی مکان پیک ها در طیف مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج MBJLDA به دست آماده از محاسبات ابتا به ساکن، تطابق بسیار خوبی را با نتایج تجربی در پیش بینی مکان پیک ها در طیف بخش موهومی تابع دی الکتریک نشان می دهند. مطابق تحلیل نواری صورت گرفته، حالتهای p اتم Sb (حالتهای p اتم As) به عنوان حالتهای اولیه و حالتهای اتم InAso.5Sbo.25، InAso.5Sbo.25 ای InAso.5Sbo.3 و InAs از InAso.5Sbo.3 و InAs

**واژه های کلیدی**: بخش موهومی تابع دی الکتریک،تقریب فاز تصادفی، نیمرساناها با پهنای گاف کوچک.

#### Optical properties of narrow band gap InAs<sub>x</sub>Sb<sub>1-x</sub>(x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1) alloys

#### Namjoo, Shirin<sup>1</sup>; Puschnig, Peter<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Lorestan, Khorramabad, <sup>2</sup> Institute of Physics, University of Graz, Graz, Austria

#### Abstract

The imaginary part of dielectric function of  $InAs_xSb_{1-x}(x=0,0.25, 0.5,0.75,1)$  alloys is investigated within density functional theory utilizing the Wien2k package. The dielectric function of these alloys is investigated within the random phase approximation using both the GGA(Wu-Cohen) and the mBJLDA exchange- correlation functionals. The mBJLDA results of first-principles calculations show very good agreement with experimental data in prediction of peak positions of imaginary part of dielectric function spectrum. According to the band analysis, the Sb (5p) (As 4p) states as initial states and In s states as final states play the major role in optical transitions for InSb and InAs\_0.25Sb\_0.75(InAs, InAs\_0.5Sb\_0.5 and InAs\_0.75Sb\_0.25).

*Keywords*: Imaginary part of dielectric function, Random Phase Approximation, Small band gap semiconductors PACS No.71, 78

یکی از راههای تغییر کارایی و عملکرد نیم ¬رسانا ها در جهت ایجاد مواد جدید، تشکیل آلیاژهایی از این مواد است. آلیاژهای نیم ¬رسانا یک بازه از ویژگی های غیر قابل انتظار را ارائه میدهند و از نظر فناوری خصوصاً در صنایع الکترونیک و الکترواپتیک بسیار مورد توجه هستند. در میان ترکیبهای نیمرسانای V-III، InSb ،InAs

نیمرساناها از جالب ترین و مفیدترین گروه جامدها هستند که کاربردهای فراوانی در صنعت دارند. از جمله ترکیبهای نیمرسانا میتوان به ترکیبهای نیمرسانای V-III اشاره کرد. ترکیب های نیم رسانای V-III از دو عنصر تشکیل شدهاند که یکی از آنها متعلق به گروه سوم و دیگری متعلق به گروه پنجم جدول تناوبی است.

مقدمه

هستند. به دلیل داشتن پهنای گاف کوچک، این دسته از ترکیبها کاربردهای اپتوالکترونیکی گسترده ای در ناحیه فروسرخ دارند. این ترکیبها میتوانند در ساخت بسیاری از ابزارهای الکترونیکی و همچنین اپتوالکترونیکی به کارگرفته شوند. از جمله این ابزارها می-توان به آشکارسازهای نوری فروسرخ اشاره کرد. با توجه به کاربرد-های گسترده آشکارسازهای فروسرخ در زمینههای متعددی از قبیل پزشکی، نظامی، فضایی و ... میتوان به اهمیت مطالعه ویژگیهای بنیادی ترکیبهای InSb ،InAs و آلیاژهای InAs<sub>x</sub>Sb<sub>1-x</sub> به منظور بهبود بخشیدن به کارایی این ابزارهای اپتوالکترونیک پی برد. علیرغم اهمیت و کاربرد فوق العاده زیاد این دسته از آلیاژها، اکثر مطالعات صورت گرفته روی این ترکیب ها محدود می شود به بررسی خواص الکترونی و ساختاری و مطالعات انجام شده در راستای بررسی خواص اپتیکی این دسته از آلیاژها بسیار محدود است. به همین منظور در این مطالعه به بررسی بخش موهومی تابع دی الکتریک آلیاژهای InAs<sub>x</sub>Sb<sub>1-x</sub> پرداخته شده است. مطالعه حاضر در ادامه مطالعهای است که توسط نامجو و همکاران به منظور بررسی خواص ساختاری و الکترونی این دسته از آلیاژها صورت گرفته است [۱].

#### روش و جزئیات محاسبات

محاسبات با استفاده از کد کامپیوتری WIEN2K [۲] و بر پایه نظریه تابعی چگالی و روش امواج تخت بهساخته خطی با پتانسیل کامل (FP- LAPW) انجام شده است. پارامتر Rk<sub>max</sub> (R) شعاع کوچکترین کره مافین-تین و K<sub>max</sub>، بردار موج قطع برای بسط تابع موج بر حسب امواج تخت در ناحیه بین جایگاهی است) برابر ۸ و بردار موج قطع برای بسط پتانسیل و چگالی بار در ناحیه بین جایگاهی ۲۱= G<sub>max</sub> انتخاب شد. محاسبات در حضور برهمکنش اسپین- مدار انجام شده است تعداد ۲۰۰۰ نقطه k بهمنظور مطالعه ویژگیهای اپتیکی و ساختارنواری این ترکیبها در نظرگرفته شده است. برای مطالعه ساختارنواری و ویژگیهای اپتیکی ترکیبهای است. برای مطالعه ساختارنواری و ویژگیهای اپتیکی ترکیبهای است. مدام (SGA (Wu-Cohen) از پتانسیل تبادلی استفاده شده است.

نتايج

InAs و InSb نیم ¬رساناهایی با ساختار سولفید روی هستند. آلیاژ -های سهتایی (InAs<sub>x</sub>Sb<sub>1-x</sub>(x=0.25, 0.5, 0.75، در حقیقت آلیاژ -های شبه دوتایی هستند که در آنها اتمهای As و Sb روی زیرشبکه As/Sb قرار گرفتهاند. در این مطالعه تنها آلیاژهای منظم در کوچکترین ابریاخته ممکن در نظر گرفته شده اند. کوچکترین ساختار منظم برای InAs<sub>0.25</sub>Sb<sub>0.75</sub> و InAs<sub>0.75</sub>Sb<sub>0.25</sub> یک یاخته مکعبی ساده و برای InAs<sub>0.5</sub>Sb<sub>0.55</sub> یک یاخته چهارگوشی است.

برای محاسبه تابع دیالکتریک باید سهم گذارهای دروننواری و بیننواری محاسبه شوند. در دمای صفر کلوین، سهم ناشی از گذار-های دروننواری فقط برای فلز ها قابلتوجه است. گذارهای بین نواری به دوسهم گذارهای مستقیم و همچنین غیرمستقیم تقسیم می-شود. در اینجا ما از گذارهای غیرمستقیم که شامل پراکندگی فونونی است و در واقع پیش بینی می شود که این دسته از گذارها سهمی بسیار جزئی در تابع دیالکتریک داشته باشند چشم پوشی میکنیم. برای محاسبه سهم بین نواری ناشی از انتقالهای مستقیم الکترونی میبایست یک جمع بندی روی تمام انتقالهای ممکن از حالتهای پر شده، به حالت های پر نشده را محاسبه کرد، که برای این کار در محاسبه حاضر از تقریب فاز کاتوره ای استفاده شده است. تابع دی-الکتریک یک تانسور متقارن با ٦ عنصر مستقل است که بسته به تقارن موجود در بلور این تعداد کمتر نیز خواهند شد. برای ساختارها با تقارن مکعبی، تنها یک عنصر مستقل  ${
m Im} arepsilon_{xx}$  وجود دارد در حالی که برای ساختارهایی از قبیل چهارگوشی، دو مولفه مستقل وجود دارد. در ادامه نتایج بهدست آمده از مطالعه ویژگی های اپتیکی تركيبهاى InAs<sub>0.25</sub>Sb<sub>0.75</sub>،InSb ،InAs و InAs<sub>0.75</sub>Sb<sub>0.25</sub> با تقارن مکعبی و همچنین InAs<sub>0.5</sub>Sb<sub>0.5</sub> با تقارن چهارگوشی، با بهکارگیری تقریب فاز تصادفی و با بکارگیری پتانسیل تبادلی همبستگی mBJLDA و همچنین (GGA (Wu-Cohen) آورده شده است. بهمنظور انجام مقایسه بهتر طیفهای اپتیکی با ساختارهای نواری، در شکل ۱ بخش موهومی تابع دیالکتریک برای InAs و InSb همراه با ساختارهای نواری این ترکیبها نشان داده شده است. همچنین در این شکل نتیجه های تجربی موجود در ارتباط با بخش-موهومی تابعدیالکتریک این ترکیبها آورده شده است [٥]. قلههای اصلی  $(\omega)$   $\epsilon_r(\omega)$  با حروف b، b و b نام گذاری شده اند. براساس

بررسی نواری صورت گرفته ، حالتهای p اتم Sb (حالتهای p اتم AS) و حالتهای s اتم In به ترتیب به عنوان حالت های اولیه و نهایی نقش اصلی را در گذارهای اپتیکی ترکیبهای (InAs) InSb دارند و منشأ ساختارهای a، b و c ناشی از این انتقالها است. برای هردو ترکیب InAs و InSb قله a از گذارهایی بین بالاترین نوارهای ظرفیت (۲۷امین و ۲۸مین نوارها) و پائین ترین نوارهای رسانش (۲۹امین و ۳۰مین نوارها) در حوالی نقطه L در منطقه نخست بریلوئن ناشی می شود.



شکل ۱: ساختار نواری (پایین) و بخش موهومی تابع دیالکتریک (بالا) ترکیبهای InAs و InSb با بکارگیری تابعیهای تبادلی همبستگی mBJLDA و ( GGA (Wu- Cohenبههمراه نتایج تجربی موجود [۵].

قله b که از برهمکنش اسپین – مدار ناشی می شود، ناشی از گذار-هایی است که از ۲۵ امین و ۲٦ امین نوارها به پائین ترین نوارهای رسانش (۲۹ امین و ۳۰ امین نوارها) در اطراف نقطه L صورت می گیرد. قله c ناشی از گذارهایی است که بین بالاترین نوارهای طرفیت (۲۷امین و ۲۸امین نوارها) و پائین ترین نوارهای رسانش (۲۹امین و ۳۰امین نوارها) در حوالی نقطه X در منطقه نخست بریلوئن صورت می گیرد. همان گونه که در شکل ۱ نشان داده شده است، مکان قلههای a، d و c در سازگاری عالی ای با نتیجه های تجربی موجود قراردارند [٥]. محاسبات mBJLDA ارتفاع قلههای

a و b را کمتر و قله c را بیشتراز مقدارهای تجربی برآورد میکند. علت این اختلاف می تواند ناشی از اثرات اکسیتونی باشد که در این مطالعه درنظرگرفته نشده است. همچنین نتایج بدست آمده با بكارگیری پتانسیل تبادلی همبستگی mBJLDA، در مقایسه با GGA (Wu- Cohen) در توافق بیشتری با نتایج تجربی قرار دارد. شکافتگی بالاترین نوارهای ظرفیت در نقطه L برای ترکیبهای InAs و Insb برابر با تفاوت انرژی بین مکان قلههای a و b است و درواقع این شکافتگی از برهمکنش اسپین– مدار نشات میگیرد. همانگونه که از جدول ۱ مشاهده می شود، هنگامی که از InAs بهسمت InSb میرویم، تمام ساختارهای اصلی در قسمت موهومی تابع دىالكتريك بەسمت انرژىھاى پائين تر ميل مىكنند. علت اين رفتار می تواند به کمتر بودن گاف نواری InSb در مقایسه با InAs مرتبط شود. در شباهت با ترکیب های دوتایی InAs و InSb، قله های اصلی (ω) ε<sub>γ</sub> (ω و b ، a و ع الیاژها با حروف b ، a و c نامگذاری شده اند. . مکان قلههای b، a و c به همراه نتایج تجربی موجود در جدول ۱ آورده شده اند.

جدول۱، مقادیر محاسباتی مکان قله های a و b به همراه مقادیر تجربی موجود برای آلیاژ های (InAs<sub>x</sub>Sb<sub>1-x</sub> (x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1

<i>غلظت</i> آلياژ	مکان قله a برحسب الکترونولت (مقدار تجربی)	مکان قله b برحســب الکترونولـت (مقـدار تجربی)	مکان قله C بر- حسب الکترون- ولت (مقدار تجربی)
•	1/97(1/9)	۲/۳۳ (۲/۴)	٣/٨٢(٣/٩)
٠/٢۵	۱/۲۵	۲/• ۸	٣/٩۶
•/۵	۱/۸۴	۲/۱۶	۴/۰ ۱
۰/۷۵	۲/•۲	۲/۳	۴/۳۶
١	٢/۴۶(٢/۵)	۲/۷۶ (۲/۸)	۴/۴۵(۴/۴)

محاسبه انشان می دهند که حالت های p اتم Sb (حالت های p اتم (As) به عنوان حالت های اولیه و حالت های s اتم In به عنوان حالت های نهایی، نقش اصلی را در انتقال های بین نواری در طیف ایتیکی (InAs0.5Sb0.25 و InAs0.5Sb0.25) بر عهده دارند.



در ارتباط با بررسی ویژگیهای ایتیکی InSb ،InAs و آلیاژ-30 های (InAs<sub>x</sub>Sb<sub>1-x</sub> (x=0.25, 0.5, 0.75)، در این مطالعه بخش (3)20 (3)20 موهومی تابع دیالکتریک با بکارگیری تقریب فازتصادفی مورد بررسی قرار گرفته است. طیف اپتیکی بدست آمده، با بهکارگیری 10 تابعی تبادلی- همبستگی mBJLDA، در سازگاری عالی با نتیجه 0. 0 های تجربی موجود قرار دارد. قلههای اصلی در طیف بخش موهومی 3 تابع دىالكتريك در گستره انرژى • تا ٦ الكترونولت (در گسترهاى 2 که نتیجه های تجربی برای ترکیب های دوتایی InAs و InSb Energy (eV) موجود هستند) مشخص شدهاند. مطابق بررسی نواری صورت گرفته، حالتهای p اتم Sb (حالتهای p اتم As) به عنوان حالتهای اولیه و حالتهای s اتم In به عنوان حالتهای نهایی نقش اصلی را -2 -3∟ R , InSb در انتقالهای بین نواری در طیفهای ایتیکی InAs) InAs<sub>0.75</sub>Sb<sub>0.25</sub>JnAs<sub>0.5</sub>Sb<sub>0.5</sub> و InAs) InAs<sub>0.25</sub>Sb<sub>0.75</sub> دارند. . تا آنجا که ما می دانیم، علی رغم کاربرد و اهمیت فراوان آلیاژهای InAs<sub>x</sub>Sb<sub>1-x</sub>(x=0.25, 0.5, 0.75) ، به جز مطالعه حاضر هیچ گونه مطالعه تجربی و یا تئوری در ارتباط با بررسی ویژگیهای ايتيكي أنها صورت نگرفته است، بنابراين مطالعه صورتگرفته در این پژوهش میتواند مبنای کارهای تجربی ای که در آینده در راستای بررسی ویژگی های ایتیکی این آلیاژها انجام می شود، قرار گير د.

#### مرجع ها

[ $^{1}$ ] S. Namjoo, A. Rozatian and I Jabbari "Influence of lattice expansion on the topological band order of InAsxSb<sub>1-x</sub> (x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1) alloys" J. Alloys Compd. **628**, (2015) 458.

[Y]. P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka, and J. Luitz, WIEN2K, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties (Karlheinz Schwarz, Techn. Universität Wien, Austria, 2001).

[<sup>Y</sup>]. F. Tran, and P. Blaha, "Accurate Band Gaps of Semiconductors and Insulators with a Semilocal Exchange-Correlation Potential," Physical Review Letters **102**, (2009) 226401.

[\*]. Z. Wu, and R. E. Cohen, "More accurate generalized gradient approximation for solids," Physical Review B 73, (2006) 235116.
[4].D. E. Aspnes, and A. A. Studna, "Dielectric functions and optical parameters of Si, Ge, GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, and InSb from 1.5 to 6.0 eV," Physical Review B 27 (1983), 985-1009.



ملکل ۲. بخش موهومی تابع دی الکتریک (باد) و ساختار نواری (پایین) ۲ های (InAs<sub>x</sub>Sb<sub>1-x</sub> (x=0.25, 0.5, 0.75

همانگونه که شکل ۲ نشان میدهد با رفتن از InAs<sub>0.75</sub>Sb<sub>0.25</sub> به-سمت InAs<sub>0.25</sub>Sb<sub>0.75</sub>، تمام ساختارها در بخش موهومی تابع دی الکتریک بهسمت انرژیهای پائین تر میل می کنند. علت این روند با ساختارنواری این ترکیبها در ارتباط است. با رفتن از InAso.25Sbo.25 بەسمت InAso.25Sbo.75، گاف نوارى كاھش می یابد و بههمین علت ساختارهای اصلی در بخش موهومی تابع دىالكتريك بەسمت انرژىھاى پايين تر ميل مىكنند. قله (a(b براى InAs<sub>0.25</sub>Sb<sub>0.75</sub> و InAs<sub>0.75</sub>Sb<sub>0.25</sub> ناشی از انتقال هایی است که از ۱۱۱امین و ۱۱۲مین (۱۰۹امین و ۱۱۰مین) نوار به پائین ترین نوارهای رسانش (۱۱۱امین و ۱۱٤امین نوارها ) صورت می گیرد. برای InAs<sub>0.5</sub>Sb<sub>0.5</sub>، قلههای a و b) c) از گذارهایی بین ٥٥ امین و ٥٦ امين (٥٣ امين و ٥٤ امين) نوارها به پايينترين نوارهاي رسانش، یعنی ۵۷ امین و ۵۸ امین نوارها ناشی میشود. همانگونه که در جدول ۱ نشان داده شده است، تغییر مکان قلههای a و b بر حسب غلظت ناخالصی غیر خطی است در صور تیکه مکان قله C با افزایش غلظت ناخالصی به طورخطی افزایش می یابد.

نتيجه گيرى





### مطالعه خواص ساختاری، الکترونی و اپتیکی پروسکایت های دوبعدی هیبریدی بدون سرب PEA)<sub>2</sub>Gel<sub>4</sub>) با استفاده از نظریه تابعی چگالی

#### خادمی ، تهمینه' ؛ مولاروی ، طیبه'

<sup>۱</sup>دانشکاره فیزیک و مهنارسی هسته ای ، دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود ۲دانشکاره فیزیک و مهنارسی هسته ای ، دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود

#### چکیدہ

اخیراً پروسکایت های دو بعدی به عنوان جایگزینی امیدوارکننده برای پروسکایت های سه بعدی ظاهر شده اند. در پروسکایت های دو بعدی بدون سرب، به دلیل اثر محدودیت کوانتومی خواص الکترونی منحصر به فردی برای کاربردهای فتوولتائیک و فوتوالکتریک مشاهده شده است. در این مقاله خواص الکترونی و اپتیکی ساختار دو بعدی بدون سرب PEA<sub>2</sub>GeI<sub>4</sub>) با استفاده از محاسبات DFT بررسی شده است. نتایج محاسبات نشان داده است که ساختار دو بعدی ماختار دو بعدی بدون سرب PEA<sub>2</sub>GeI<sub>4</sub>) با استفاده از محاسبات DFT بررسی شده است. نتایج محاسبات نشان داده ماست که ساختار دو بعدی PEA<sub>2</sub>GeI<sub>4</sub>) دارای گاف نواری مستقیمی در حدود VIP است. همچنین ساختار PEA<sub>2</sub>GeI<sub>4</sub>) دارای گاف نواری مناسب و جذب اپتیکی بالایی در ناحیه مرئی است. علاوه بر این ، ثابت دی الکتریک بالاو جذب بالا نشان می دهد که این ماده پتاسیل خوبی برای استفاده در دستگاه های فتوولتائیک و اپتیکی از جمله آشکارسازهای نوری، LED سلول های خورشیدی و غیره دارد.

Study of structural, electronic and optical properties of two-dimensional leadfree hybrid perovskite(PEA)<sub>2</sub>GeI<sub>4</sub> using DFT method

#### Khademi, Tahmineh<sup>1</sup>; Movlarooy Tayebeh<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics and Nuclear Engineering, Shahrood University of Technology, Shahrood <sup>2</sup> Department of Physics and Nuclear Engineering, Shahrood University of Technology, Shahrood

#### Abstract

Recently, 2D perovskites have emerged as a promising alternative to 3D perovskites. In twodimensional lead-free perovskites, due to the quantum confinement effect, unique electronic properties have been observed for photovoltaic and photoelectronic applications. In this paper, the electronic and optical properties of the two-dimensional structure of lead-free (PEA)<sub>2</sub>GeI<sub>4</sub> using DFT calculations have investigated. The results of our research have shown that the two-dimensional structure of (PEA)<sub>2</sub>GeI<sub>4</sub> has a direct band gap of about 1.4 eV. Also it is revealed that the (PEA)<sub>2</sub>GeI<sub>4</sub> structure has a suitable band gap and high optical absorption in the visible region. In addition, high dielectric constant and high absorption indicate that this material has great potential for use in photovoltaic and optical devices, including photodetectors, LEDs, solar cells, etc.

خواص منحصر به فرد خود، به عنوان یک کاندیدای	مقدمه
امیدوارکننده در کاربردهای فتوولتائیک و فوتوالکتریک	
مانندLED ، سلولهای خورشیدی و آشکارسازهای نوری	در سال های اخیر، پروسکایتهای الی-عیرالی بدون سرب
و غيره ظاهر شدهاند [١]. رايج ترين أنها پروسكايت سرب	دو بعدی نوجه زیادی را به خود جلب دردهاند که بدلیل



هالید هیبرید (CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub>) با فرمول AMX<sub>3</sub> است که به دلیل هزینه ساخت پایین و راندمان تبدیل توان (PCE) ۲۲–۲۰درصد در سلول های خورشیدی مورد توجه جامعه دانشگاهی و صنعتی قرار گرفته است. با این حال، پروسکایت های هالید هیبریدی سه بعدی مبتنی بر سرب با دو چالش مهم روبرو هستند. اولی سمیت [۲] سرب و دومی ناپایداری ذاتی پروسکایت های الی- معدنی سه بعدی است. اخیرا پروسکایت های آلی- معدنی دوبعدی به دلیل پایداری محیطی خوب آنها به عنوان جایگزین عالی ظاهر شده اند. از نظر مفهومی، پروسکایت های دوبعدی از ساختار پروسکایت سه بعدی با برش در امتداد صفحات کریستالوگرافی خاص به دست می آیند [۳]. در این مقاله، ویژگیهای ساختاری، الکترونی و اپتیکی پروسکایت های لایهای دوبعدیPEA)2Gel4 بر اساس اصول اولیه نظریه تابعی چگالی (DFT)، برای یافتن جایگزین موثر برای پروسکایتهای آلی-غیر آلی مبتنی بر سرب در نظر گرفته شده است.

#### بخش محاسباتي

خواص اپتیکی و الکترونی PEA)<sub>2</sub>Gel<sub>4</sub> بر اساس تئوری تابعی چگالی (DFT) با استفاده از تابعی -Becke تئوری تابعی چگالی (DFT) با استفاده از تابعی -Becke و تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA) بررسی شده که در کد SIESTA [۴] پیاده سازی شده است .انرژی قطع برای مجموعه پایه موج مفحه ۳۵۰Ry در نظر گرفته شده است. منطقه بریلوین مفحه ۳۰×۴×۴ مفحه ۲۰×۴×۳ در نظر گرفته شده است. منطقه بریلوین نرای ساختار توده ای توسط یک شبکه ۳ ۱۰٫۴×۴۰ می شود . انرژی کل و هندسه ساختار با آستانه همگرایی انرژی کل و هندسه ساختار با آستانه همگرایی انرژی شد.

نتايج و بحث

### ساختار كريستالي

به طور کلی پروسکایت های لایه ای دوبعدی دارای فرمول لایه لایه (A) $_2B_{n-1}M_nX_{3n+1}$ پروسکایت به عنوان یک ساختار الکترونی چاه کوانتومی چندگانه با ورق های معدنی به عنوان چاه و ورق های آلی به عنوان سد در نظر گرفته می شود [۵]. در پروسکایت های لایه ای دو بعدی، هیچ محدودیتی برای اندازه لایه های کاتیونی آلی A وجود ندارد. A بین لایه های معدنی -BX<sub>4</sub><sup>2</sup>، هشت وجهی متال هالید گوشه ای قرار دارند. همچنین، برهمکنش واندروالسی (vdW) کاتیون های آلی بین لایه های پروسکایت وجود دارد [۶]. در این کار، ما پروسکایت های لایه ای دوبعدی PEA)<sub>2</sub>BI<sub>4</sub> را مطالعه می کنیم که در آن B از گروه IVA یعنی Ge است (شکل اطلاعات بیشتر در جدول ۱ ارائه شده است. همچنین موقعیت هندسه ساختار با استفاده از محاسبات DFT که در بخش محاسباتی توضیح داده شده ، بهینه سازی شده است. امیدواریم که تحقیقات ما با افزودن ترکیب ژرمانیوم در پروسکایتهای دو بعدی بدون سرب، دستورالعملهایی را برای توسعه در پروسکایتها ارائه دهد.



شکل ۱. سلول واحد (ساختار کریستالی) ساختار دو بعدی PEA)<sub>2</sub>GeI<sub>4</sub>)

جدول ۱. اطلاعات ساختاری پروسکایت دو بعدی Bel<sub>4</sub>(PEA)

(PEA) <sub>2</sub> GeI <sub>4</sub>	ساختار
$(C_6H_5C_2H_4NH_3)GeI4$	فرمول
Triclinic	سيستم بلوري
P1 (no. 2)	گروه فضایی



معالة فاله سادر دهمير	
ثابت های شبکه	
ثابت های شبکه	

a= 12.069	ثابت های شبکه
b=11.782	
c = 16.281	
$\alpha = 99.78$	زاويه سلول واحد
$\beta = 107.58$	
$\gamma = 89.99$	
2304.2269	حجم سلول واحد
	<b>3</b> 1

خواص الكتروني

خواص الکترونی پروسکایت های دو بعدی بدون سرب با استفاده از محاسبات DFT ، با تقریب GGA-BLYP الکترونی [۱۰] بررسی شده است. برای بررسی خواص الکترونی پروسکایت ها، مهم است که مقدار گاف نواری، شکل و ماهیت نوارها، به ویژه در لبه های نوار، در نظر گرفته شود. اثر محدودیت کوانتومی پروسکایتهای دوبعدی منجر به جابجایی نوارهای هدایت و ظرفیت می شود که به نوبه خود گاف نواری پروسکایت های دو بعدی را در مقایسه با پروسکایت های سه بعدی افزایش می دهد. در ساختارهای دوبعدی پروسکایت ها گاف نواری مستقیم است که نتیجه کاهش ابعاد می باشد [۷]. در شکل ۲، گاف نواری پروسکایت های ۲ بعدی بدون سرب  $\Gamma$ eIG



شکل ۲. ساختار نواری پروسکایت دو بعدی Gel<sub>42</sub>(PEA)

در شکل ۳، منحنی چگالی حالتهای کلی DOS وجزئی PDOS ساختار دو بعدی PEA<sub>2</sub>GeI<sub>4</sub>) برای شناسایی ویژگی های اوربیتال های نزدیک سطح فرمی مورد بررسی قرار گرفته است. همانطور که در شکل ۳ مشاهده می شود،

سهم اوربیتال های ۵p-I و ۲p-C در نوار ظرفیت و اوربیتال های ۴p-Ge و ۲p-C در نوار رسانش قابل توجه است.



شکل۳. نمودار DOS و PDOS ساختار دو بعدی DOS و PEA)

خواص اپتيكى

در این بخش، خواص اپتیکی پروسکایت دوبعدی PEA)<sub>2</sub>Gel<sub>4</sub>) برای محدوده انرژی فوتون از ۰ تا ۵eV بررسی شده است. خواص اپتیکی از تابع دی الکتریک به دست می [۳].

 $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$  (1)

در رابطه فوق ( $\omega$ )<sub>1</sub>3 قسمت حقیقی تابع دی الکتریک و ( $\omega$ )<sub>2</sub> $\delta$  قسمت موهومی تابع دی الکتریک است. بخش حقیقی تابع دی الکتریک در شکل ۴ بر اساس محاسبات GGA-BLYP نشان داده شده است [۵]. نتایج نشان می دهد که بخش حقیقی تابع دی الکتریک برای ساختار دهد که بخش حقیقی تابع دی الکتریک برای ساختار مواوت (PEA)<sub>2</sub>Gel در جهت x و z ناهمسانگرد و متفاوت هستند. ویژگی های نوری در هر دو جهت نشان داده که ساختار PEA)<sub>2</sub>Gel) در راستای تابت دی الکتریک بالا سات. ثابت دی الکتریک استاتیک ( $\omega$ ) برای ساختار دو است. ثابت دی الکتریک استاتیک ( $\omega$ ) برای ساختار دو بعدی AGP (PEA) در راستای x و z به ترتیب ۴/۵۹ و بعدی AGP (PEA) در راستای x و z به ترتیب ۳/۵۹ و نشان داده شده است. در شکل ۵ بخش موهومی تابع دی الکتریک ساختار PEA] در جهت x و z به مودار نشان دهنده خواص دی الکتریک منحصر به فرد ساختار AGP (PEA) برای کار نشان داده شده است و نتایج نمودار نشان دهنده خواص دی ایتیکی منحصر به فرد ساختار PEA] بردهای فتوولتائیک است. با توجه به بخش موهومی تابع







شکل ۴. بخش حقیقی تابع دی الکتریک پروسکایت دو بعدی (PEA)<sub>2</sub>Gel<sub>4</sub> در راستای x<sub>و</sub>z.



شکل ۵. بخش موهومی تابع دی الکتریک پروسکایت دو بعدی z<sub>2</sub> (PEA)<sub>2</sub>GeI<sub>4</sub> در راستای x<sub>2</sub>

شکل ۶ جذب اپتیکی ساختار را در محدوده انرژی -0 الکترون ولت در راستای  $X_c$  نشان می دهد. در انرژی حدود ( $\frac{105}{cm}$ ) مشاهده شده است که نشان دهنده جذب حدود  $(\frac{105}{cm})$  مشاهده سلول است که نشان دهنده جذب عالی برای کاربردهای سلول خورشیدی می باشد.





نتيجه گيري

به طور خلاصه، خواص ساختاری، الکترونی و اپتیکی پروسکایت دوبعدی PEA)<sub>2</sub>GeI<sub>4</sub>) بررسی شد. محاسبات با استفاده از روش اصول اولیه نظریه تابعی چگالی(DFT) نشان داد که پروسکایت دو بعدی GeI<sub>4</sub> دارای نشان داد که پروسکایت دو بعدی GeI<sub>4</sub> دارای یک گاف نواری مستقیم در محدوده ۱ تا ۲ eV است. همچنین ثابت دی الکتریک عالی و ضریب جذب بالا، نتایج امیدوارکننده ای را برای توسعه مواد بدون سرب برای کاربردهای اپتیکی و فتوولتائیک نشان داده اند.

#### مرجع ها

- . Volonakis, G., et al., *Cs2InAgCl6: a new lead-free halide double perovskite with direct band gap.* The journal of physical chemistry letters, 2017. **8**(4): p. 772-778.
- Y Lyu, M., et al., Addressing toxicity of lead: progress and applications of low-toxic metal halide perovskites and their derivatives. Advanced Energy Materials, 2017. 7(15): p. 1602512.
- .\* Cheng, P., et al., (C6H5C2H4NH3) 2GeI4: a layered two-dimensional perovskite with potential for photovoltaic applications. The journal of physical chemistry letters, 2017. 8(18): p. 4402-4406.
- .\* Soler, J.M., et al., *The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation*. Journal of Physics: Condensed Matter, 2002. **14**(11): p. 2745.
- .<sup>b</sup> Bhorde, A., et al., Structural, electronic, and optical properties of lead-free halide double perovskite Rb2AgBil6: a combined experimental and DFT study. ES Materials & Manufacturing, 2021. 12: p. 43-52.
- .\* Zhang, L., et al., *High-performance quasi-2D* perovskite light-emitting diodes: from materials to devices. Light: Science & Applications, 2021. 10(1): p. 1-26.
- .Y Ma, L., et al., *Tin and germanium based twodimensional Ruddlesden–Popper hybrid perovskites*



for potential lead-free photovoltaic and photoelectronic applications. Nanoscale, 2018. **10**(24): p. 11314-11319.





### ساختار و خواص الکترونی نانولولههای BeN4: مطالعه نظریه تابعی چگالی

مجیدی، رویا ا

ا گروه فیزیک، دانشکاده علوم پایه، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، تهران

#### چکیدہ

ساختار و خواص الکترونی نانولولههای BeN4 تک جداره با استفاده از مطالعات آغازین بررسی شدهاند. دو دسته از نانولولههای BeN4 تک جداره با لوله نمودن صفحههای BeN4 در دو راستای متفاوت تشکیل شدهاند. این نانولولهها (n، ) و (n، ) نامیده شدهاند. انرژی بستگی و شبیه سازی دینامیک مولکولی، پایداری حرارتی نانولولههای BeN4 را تایید میکنند. نانولولههای BeN4 تک جداره (n، ) خاصیت نیمرسانایی با گاف انرژی غیرصفر از خود نشان میدهند. گاف انرژی این نانولولهها به اندازه آنها وابسته است. گاف انرژی نانولولههای BeN4 تک جداره (n، ) فابل ملاحظه نیست و این نانولولهها مانند شبه فازها میکنند. تایج نشان میدهند که نانولولههای PBN4 بخواص الکترونی متنوع برای استفاده در وسایل الکترونیکی در آینده مفید هستند. واژههای کلیدی: نانولوله، BeN4 نیمرسانا، شبه فاز، نظریه تابعی چگالی

#### Structural and Electronic Properties of BeN<sub>4</sub> Nanotubes: A Density Functional Theory Study

#### Majidi, Roya<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Rajaee Teacher Training University, Tehran

#### Abstract

The structural and electronic properties of single-walled  $BeN_4$  nanotubes are studied using first-principles calculations. Two sets of single-walled  $BeN_4$  nanotubes, namely, (n, 0) and (0, n) are formed by rolling up the  $BeN_4$  sheets along two different sides into a cylinder. The cohesive energies and molecular dynamics simulations confirm the thermal stability of  $BeN_4$  nanotubes. The (n, 0)  $BeN_4$  nanotubes exhibit semiconducting properties with non-zero band gaps. Their band gaps are dependent on the tube size. The band gap of (0, n)  $BeN_4$  nanotubes is not considerable and these tubes behave as semimetals. The results propose  $BeN_4$  nanotubes with various electronic properties to use in future nanoelectronic devices.

*Keywords*: nanotube; BeN<sub>4</sub>; semiconductor; semimetal; density functional theory.

PACS No. 81, 73

گرافن یک شبکه لانه زنبوری از اتمهای کربن است. بسیاری از پدیدههای فیزیکی جدید و رفتار الکترونی گرافن بهدلیل وجود مخروط دیراک است. بهعنوان مثال، اثرهای هال کوانتومی مختلف در گرافن مشاهده شدهاند. همچنین، بهدلیل ساختار بدون جرم مخروط دیراک، حاملهای بار با تحرک بسیار بالا در گرافن وجود دارند.

مقدمه

سالها تصور بر این بود که بلورهای دوبعدی در طبیعت ناپایدار هستند تا در سال ۲۰۰۶ که صفحهای به ضخامت یک اتم کربن معروف به گرافن با موفقیت ایجاد شد [۱]. کشف گرافن بهدلیل چشمانداز امیدوارکننده آن در تحقیقهای پایه و کاربردی توجه زیادی را به خود جلب نمود [۲ و ۳].

نانولولههای کربنی با ساختار گرافنی یکی دیگر از دگرشکلهای کربن محسوب میشوند. در سال ۱۹۹۱ نانولولههای کربنی چندجداره و دو سال بعد نانولولههای کربنی تکجداره مشاهده شدند [٤]. سپس نانولولههای کربنی به دلیل ساختار و خاصیتهای عجیبشان توجه خاصی را به خود جلب نمودند و به سرعت فیزیک نانولولههای کربنی تبدیل به یک زمینه تحقیقاتی جدید شد. از آن پس، با وجود گذشت سالها همواره مطالعههای وسیعی روی خاصیتهای فیزیکی و کاربردهای نانولولههای کربنی انجام می گیرند.

علاوه بر صفحههای دوبعدی کربنی با ساختار گرافنی، صفحههای دوبعدی غیرکربنی نیز توجه بسیاری را در سالهای اخیر به خود جلب نمودهاند. با لوله نمودن این صفحهها نانولولههای جدیدی شکل می گیرند. در این پژوهش به معرفی ساختار اتمی و خواص الکترونی یکی از این نانولولهها پرداخته می شود.

#### جزئيات شبيهسازى

شبیهسازیها با استفاده از نرمافزار OpenMX3.8 انجام شده است که این برنامه بر پایه نظریه تابعی چگالی است [٥]. در محاسبات از تابعی پردو – بورک – ارنزرهف و تقریب گرادیان تعمیم یافته برای پتانسیل همبستگی تبادلی استفاده شده است. سهم برهمکنش واندروالس با روش گریم وارد شده است. انرژی قطع برهمکنش واندروالس با روش گریم وارد شده است. انرژی قطع اماه ۱۹۰ انتخاب شده است. همه ساختارها با شرط قطع نانولولهها با استفاده از شبیهسازی دینامیک مولکولی آغازین بررسی شدهاند. شبیهسازیها در دمای اتاق به مدت ps با گام زمانی شدهاند. نرم افزار MVT را فراهم میکند [٥]. دما با ترموستات نوز – هوور ثابت نگه داشته شده است.

ساختار و خواص الکترونی نانولولههای BeN4 مساختار و خواص الکترونی نانولولههای تشکیل شده است صفحه BeN4 از حلقههای پنج و شش ضلعی تشکیل شده است. [7]. ساختار اتمی صفحه BeN4 در شکل ۱ رسم شده است. سلول

واحد آن شامل یک اتم Be و چهار اتم N است. ثابتهای شبکه N–،N–N(1) و b = 4.27 Å و Be است. طول پیوندهای (1/N م-، N(2) و N(2) N(2) و N/۲۵۸ و ۱/۷٤٤ آنگستروم هستند.



با چرخاندن صفحههای BeN4 به صورت استوانه می توان نانولولههای BeN4 ایجاد نمود. با پیچاندن صفحههای BeN4 در راستاهای مختلف، امکان تشکیل نانولولههای BeN4 مختلف وجود دارد. در اینجا دو دسته نانولولهها BeN4 که (n.) و (n.) و (n.) و (n.) و (n.) و (n.) و (n.) نامیده شدهاند، در نظر گرفته شدهاند. برای تشکیل نانولولههای idoیده شدهاند، در نظر گرفته شدهاند. برای تشکیل نانولولههای idoیده شدهاند، در راستای بردار A و برای تشکیل idoیده شدهای BeN4 (n.)، صفحه در راستای بردار B لوله می شود. از اینرو نانولولههای BeN4 (n.) و (n.) به ترتیب idouble و از اینرو نانولولههای BeN4 (n.) و (n.) به ترتیب دارای قطرهای  $\frac{nA}{\pi}$  و  $\frac{nA}{n}$  آنگستروم است. برای مثال، ساختار اتمی نانولولههای BeN4 (n.) در شکل ۲ نشان داده شدهاند.



شکل ۲ : ساختار اتمی نانولولههای BeN4 (۷،۰) و (۷،۰)

در نانولولههای BeN4 (۰، ۱)، طول پیوندهای (N–N(1) و N–N(1) و ۱/۳۵۹ و ۱/۳۵۹ و ۱/۳۵۹ و ۱/۳۵۹ و ۱/۳۵۹ و ۱/۳۵۹ و آنگستروم هستند. برای نانولولههای BeN4 (۰،۰۰)، طول پیوندهای آنگستروم هستند. برای نانولولههای ۲۰۳۹ و N–N(1) و N–N(1) و N–N(1) و N–N(1) به ترتیب برابر با ۱/۳۲۹، ۱/۳٤۷ و ۱/۷٤۳ نانولولهها، انرژی ساختار نانولولهها، انرژی بستگی،  $E_{coh}$ ، آنها محاسبه شده است. انرژی بستگی با استفاده از رابطه زیر محاسبه می شود:

$$E_{coh} = \left[ E_{tot} - (n_{Be} E_{Be} + n_N E_N) \right] / (n_{Be} + n_N)$$
(1)

در اینجا  $E_{tot}$  انرژی کل نانولوله است.  $E_{Be}$  و  $E_N$  به ترتیب انرژی اتمهای Be و N هستند.  $n_B$  و  $n_N$  به ترتیب انرژی اتمهای Be و N را مشخص میکنند. با این تعریف ساختارهای با انرژی بستگی منفی از نظر انرژی پایدار هستند.

انرژی بستگی نانولولههای BeN4 برحسب قطر و اندازه نانولولهها در شکل ۳ رسم شدهاند. مقادبر منفی نشان میدهند که نانولولههای BeN4 پایدار هستند. نتایج نشان میدهند که انرژی BeN4 نانولولههای BeN4 (۰،۰) منفی تر از نانولولههای BeN4 (۰،۰) هستند. بنابراین نانولولههای BeN4 (۰،۰) پایدارتر از نانولولههای BeN4 (۰،۰) هستند. با افزایش قطر نانولوله، انرژی بستگی در هر دو مدل نانولوله کاهش مییابد. در نهایت انرژی بستگی نانولولهها با قطرهای به اندازه کافی بزرگ به مقدار انرژی بستگی صفحه BeN4 میرسد.



شکل ۳: انرژی بستگی نانولولههای BeN4 برحسب قطر و اندازه نانولولهها پایداری حرارتی نانولولههای BeN4 در دمای اتاق با استفاده از شبیهسازیهای دینامیک مولکولی تحقیق شدهاند. انرژی کل

نانولولههای (۷،۰) و (۷،۰) BeN4 برحسب زمان شبیهسازی مطالعه شده است (شکل ٤). نتایج نشان میدهند که مقادیر انرژی حول مقدار ثابتی نوسان مینماید. همچنین ساختار این نانولولهها در طول زمان شبیهسازی و در دمای اتاق بدون تغییر باقی میماند. بنابراین، نانولولههای BeN4 به لحاظ حرارتی پایدار هستند.



شکل ٤: ساختـار نوار الکترونی و چگالی حالات نانولولههای BeN4 (۷،۰) و (۰.۷)

در مطالعات پیشین نشان داده شده است که صفحه BeN4 دارای خاصیت شبهفلزی هستند [۲-۸]. در اینجا خاصیت الکترونی نانولولههای BeN4 مطالعه شده است. به این منظور ساختار نوار الکترونی و چگالی حالات آنها محاسبه شدهاند. برای مثال، ساختار نوار الکترونی و چگالی حالات نانولولههای BeN4 (۰،۰) و (۰،۰) در شکل ٥ رسم شدهاند. خط قرمز تراز انرژی فرمی را نشان می دهد. در نانولوله BeN4 (۰،۰) گاف انرژی مشاهده می شود. بنابراین این نانولوله دارای خاصیت نیمرسانایی است. در نانولوله ABM4 (۰،۰)، نوارهای رسانش و ظرفیت یکدیگر را در تراز انرژی فرمی به صورت خطی قطع نمودهاند. مقدار چگالی



دهنده خاصیت شبهفلزی در نانولوله BeN4 (۰،۷) هستند. مطالعه دیگر نانولولههای BeN4، حاکی از رفتار نیمرسانایی و فلزی در نانولولههای (n،۰) و (n.۰) هستند.



شکل ۵: ساختـار نوار الکترونی و چگالی حالات نانولولههای BeN4 (۷،۰) و (۰.۷)

گاف انرژی نانولولههای BeN4 (۱٬۰۰) برحسب قطر و اندازه نانولوله در شکل ۲ رسم شده است. نتایج نشان می دهد که نانولولههای BeN4 (۱٬۰۰) با ۲۱>۸ نیمرسانا هستند. گاف انرژی با افزایش قطر نانولوله کاهش می یابد. در نهایت در نانولولههای رفتن گاف انرژی مربوط به کاهش انحنای دیواره نانولولهها است. نانولولههای BeN4 (۱٬۰۰) بزرگ مشابه صفحه BeN4 دارای رفتار فلزی هستند. در نانولولههای BeN4 (۱٬۰۰) با ۸>۸ گاف انرژی فلزی هستند. در نانولولههای BeN4 (۱٬۰) با ۸>۸ گاف انرژی رفته است. بنابراین نانولولههای BeN4 (۱٬۰) با ۸>۸ گاف انرژی این ترتیب نانولولههای BeN4 (۱٬۰) با ۸<۸ فلز هستند. به رفته است. بنابراین نانولولههای BeN4 (۱٬۰) با ۸۵



شکل 7: گاف انرژی نانولولههای BeN4 برحسب قطر و اندازه نانولولهها

نتيجه گيري

در این پژوهش ساختار و خواص الکترونی نانولولههای BeN4 تک جداره بر اساس نظریه تابعی چگالی بررسی شدهاند. امکان تشکیل دو دسته از نانولولههای BeN4 به نامهای (۰،۰) و (۰،۰) و (۱،۰) BeN4 با لوله نمودن صفحات BeN4 بررسی شدهاند. مقادیر انرژی بستگی منفی و نتایج شبیهسازی دینامیک مولکولی نشان میدهند که این نانولولههای BeN4 پایدار هستند. مطالعه رفتار الکترونی این نانولولههای BeN4 پایدار هستند. مطالعه رفتار الکترونی این نانولولههای BeN4 پایدار هستند. مطالعه رفتار الکترونی این نانولولهها به قطر و نوع آنها بستگی دارد. نانولولههای BeN4 با نولولههای Autor (۱۰) نیمرسانا با گاف انرژی وابسته به اندازه نانولولهها هستند. نانولولهها به قطر و نوع آنها بستگی دارد. نانولولههای Autor (۱۰) نیمرسانا با گاف انرژی وابسته به اندازه نانولولهها میتند. نانولولهها مستند. میتایج نشان میدهند که نانولولههای BeN4 با خواص الکترونی میند. نانوی برای استفاده در وسایل الکترونیکی در آینده مفید هستند.

مرجعها

[1] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, et. al. "Electric field effect in atomically thin carbon films" *Science* **306**, 666 (2004).

[2] K.S. Novoselov, V.I. Falko, L. Colombo, P.R. Gellert, M.G. Schwab, K. Kim, "A roadmap for graphene" *Nature* **490**, 192 (2012).

[3] D.S.L. Abergel, V. Apalkov, J. Berashevich, K. Ziegler, T. Chakraborty, "Properties of graphene: a theoretical perspective" *Adv. Phys.* **59**, 261 (2010).

[4] S. Iijima, "Helical microtubules of graphitic carbon" *Nature* **354**, 56 (1991).

[5] T. Ozaki, H. Kino, J. Yu, M.J. Han, et. al., User's Manual of OpenMX Version 3.8, http://www.openmx -square .org.

[6] M. Bykov, T. Fedotenko, S. Chariton, D. et. al. "High-Pressure Synthesis of Dirac Materials: Layered van der Waals Bonded BeN4 Polymorph" *Phys. Rev. Lett.* **126**, 175501 (2021).
[7] B. Mortazavi, F. Shojaei, X. Zhuang, "Ultrahigh stiffness and

[7] B. Mortazavi, F. Shojaei, X. Zhuang, "Ultrahigh stiffness and anisotropic Dirac cones in BeN4 and MgN4 monolayers: a first-principles study" *Mater. Today Nano* **15**, 100125 (2021).

[8] R. Majidi, "Structural and electronic properties of single-and doublewalled BeN4nanotubes: First-principles calculations" *Phys. Lett. A* **438**, 128108 (2022).





### ساخت و بررسی خواص لایه نازک ابررسانای YBarCurOv-6 ساخته شده به روش لایهنشانی چر خشی

عربييگي، فاطمه ؛ شاكري يور، حميده ؛ نجات بخش، نويد ؟؛ مكاريان، محمد حسين ٢ · دانشکاره فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان ۱۱ ۸۲۱–۸۶۱۶۸ ۲ شرکت بهیار صنعت سیاهان، شهرک علمی تحقیقاتی اصفهان، اصفهان پست الكترونيكي: hshakeri@iut.ac.ir

چکيده

در این پژوهش، لایه نازک ابررسانای YBCO به روش لایهنشانی چرخشی ساخته شده است. با بهینه کردن مشخصههای مختلف در روش ساخت، سعی شده گذار ابررسانایی تیزی به دست آید. نتایج پذیرفتاری مغناطیسی و مقاومت الکتریکی، گذار تیز ابررسانایی را تایید میکنند. همچنین نتایج پراش اشعه ایکس، رشد لایه در راستای محور c را نشان می دهد. واژه های کلیدی: ابررسانای دمایلا، YBCO، لا به نازک، لا به نشانی چرخشی، گذار ابررسانایی

### Investigation of Physical Properties of YBa<sub>Y</sub>Cu<sub>Y</sub>O<sub>Y-δ</sub> Thin Film Superconductor Prepared by Spin Coating Method

#### Arabbeygi, Fatemeh'; Shakeripour, Hamideh'; Nejatbakhsh, Navid'; Mokarian, Mohammadhossein'

Department of physics, Isfahan university of technology, Isfahan 84156-83111 Behyar Sanaat Sepahan Co, Isfahan Science & Technology Town, Isfahan

#### Abstract

In this study, the YBCO superconducting thin film is prepared by the spin coating method. By optimizing different parameters in preparation method, it has been tried to obtain a sharp superconducting transition. The results of magnetic susceptibility and electrical resistance measurements confirm the sharp transition of superconductivity. Also, X-ray diffraction results show the growth of crystals along the c-axis. Keywords: High temperature superconductor, YBCO, Thin film, Spin coating, superconducting transition

PACS No.

ساخت لایه نازک ابررسانا به صورت تک محوره، در راستای محور در ابررساناهای دمابالای کپهای BarCurOv<sub>-ð</sub> به دلیل وجود *c*، باعث افزایش مقدار J<sub>c</sub> تا مرتبهی MA میشود. روش لایه نشانی رسوب محلول شیمیایی در سه دههی اخیر به طور گسترده مورد توجه قرار گرفته است [٤-١]. مزیت اصلی این روش نسبت

مرزدانههای با زاویهی بزرگ، مقدار چگالی جریان بحرانی (J<sub>c</sub>) کم است. برای کاربردی کردن این ابررساناها به J<sub>c</sub> بالایی نیاز است.

مقدمه

ڎٳؿڲٳڋ ڹؠۑؾۑؽ

> به روش های فیزیکی عبارت است از: کنترل راحت تر ترکیب و استوکیومتری عناصر به کار رفته در لایه، قابلیت تعمیم برای نمونههایی با ابعاد بزرگ تر، عدم نیاز به تجهیزات خلاء و صرفه اقتصادی [<sup>0</sup>]. از این رو، تلاش برای ساخت لایهی ابررسانا بر اساس روشی بدون نیاز به خلاء از اواخر دههی ۹۰ افزایش پیدا کرد. اوایل دههی اول قرن ۲۱ نمونههایی به روش شیمیایی، بدون نیاز به خلاء با کیفیت عالی گزارش شدند. ابررساناهای دمابالا با توجه به کاربردهای متفاوتی که دارند، روی زیرلایههای مختلفی مانند زیرلایههای تکبلور و بسبلور، رساناهای روکشدار، نوارها و ... لایهنشانی می شوند [<sup>1</sup>]. لایههای نازک ابررسانا در ساخت ادوات مایکروویو، بالومتر، اسکویید و ساخت سیمهای نسل دوم ابررسانا کاربرد دارند. برای ساخت موارد ذکر شده نیاز به ساخت لایهی نازک ابررسانا با کیفیت بالا است.

> در این پژوهش، از روش تجزیهی فلزهای آلی (MOD) برای ساخت لایه نازک ابررسانای دمابالای ایبکو استفاده شده است که سعی شده با تغییر مشخصههای مختلف در روش ساخت، به لایه-ای با خواص مطلوبتر دست پیدا کنیم.

#### روش ساخت

برای ساخت محلول مورد نیاز برای لایهنشانی ابتدا پودرهای استات ایتریوم، باریوم و مس با نسبت وزنی ۳ :۲ :۲-۲ توزین می شوند و در حلال پروپیونیک اسید و محلول آمونیاک به عنوان عامل چنگالهساز حل می شوند. با حرارت دادن، حلال از محلول خارج شده و ژل آبی رنگی به دست می آید. ژل را در متانول حل کرده و مجددا تحت حرارت قرار داده تا به ژل تبدیل شود. این عمل را چندین مرتبه تکرار کرده و در نهایت با توجه به غلظت موردنظر متانول اضافه می کنیم. اضافه کردن و تبخیر متانول برای خارج شدن اسید و آب از محلول انجام می شود. بعد از آمادهسازی، محلول را توسط دستگاه لایهنشانی چرخشی با سرعت (STIOr) به مدت ۱ دقیقه، لایهنشانی می کنیم. لایه را در دمای مرای در دمای می کنیم. محلول اند در می و ترا در دمای

این مرحله را چندین مرتبه تکرار کرد. سپس لایه تحت شار اکسیژن مرطوب در دمای ۵۰۰ درجه سانتی گراد قرار داده می شود؛ در این مرحله مواد آلی تجزیه شده و فاز بلوری لایه با پخت در دماهای بالاتر، حدود ۸۰۰ درجه سانتی گراد، تحت شار آرگون شکل می گیرد. در این مرحله فاز تتراگونال YBCO تشکیل می-شود. سپس با کاهش دما در دمای ۵۰۰ درجه سانتی گراد نمونه در اتمسفر اکسیژن خشک، اکسیژن گیری می کند و به فاز ارتورومبیک می رود.

#### بحث و بررسی

از نمونه ها آنالیز پذیرفتاری مغناطیسی و مقاومت الکتریکی گرفته شد. نتیجه آنالیز پذیرفتاری در شکل ۱ نمایش داده شده است. طبق نمودار، نمونه با کاهش دما دیامغناطیس کامل می شود. گذار ابررسانایی، پهنای کمی دارد که این نشان دهنده ی یکنواخت بودن لایه و نبود تخلل در آن و بالا بودن چگالی جریان بحرانی است.



شکل ۱: نمودار پذیرفتاری مغناطیسی بر حسب دما برای لایه نازک ۲.۶۰ YBarCurOv تحت میدان مغناطیسی ۸/۳ /۰ و فرکانس ۳۳۳ Hz.

در شکل ۲، نمودار مقاومت بر حسب دما رسم شده است که گذار از فاز هنجار به ابررسانایی را نشان میدهد. مقاومت نمونه در فاز معمولی، رفتار فلزی دارد. به منظور تعیین ساختار نمونه، آنالیز پراش اشعه ایکس (XRD) از لایه گرفته شد که نتایج آن در شکل ۳ نمایش داده شده است. طبق



شکل حضور قلههای (۰۰۲)، (۰۰۳)، (۰۰۴) و ... نشاندهندهی رشد مناسب دانهها در راستای محور c است. قلههای مربوط به زیرلایه در شکل مشخص شدهاند. فاز ثانویهی BaCOr مشاهده نشده است. قله در زاویهی ۳۱/۷۵ درجه مربوط به فاز تتراگونال YBCO است.



شکل۲: نمودار مقاومت الکتریکی بر حسب دما برای لایه نازک ۵-YBarCurOY.



شکل ۳: الگوی پراش اشعه ایکس (مقیاس لگاریتمی) برای لایهی YBCO رشد یافته بر روی زیرلایهی SrTiOr .

#### نتيجه گيرى

ساخت لایهنازک ابررسانای YBCO با توجه به نتایج اندازه-گیریهای پذیرفتاری و مقاومت الکتریکی، با موفقیت انجام شد. گذار تیز ابررسانایی نشان میدهد نمونه بافت همگنی دارد. طبق

نتیجه آنالیز پراش اشعه ایکس، لایه رشد خوبی در جهت محور c داشته است. رشد در این جهت، باعث افزایش چگالی جریانی بحرانی می شود.

سپاس گزاری

از همکاری آقای خالید رحمانی در اندازهگیری آنالیز نمونهها و هم چنین از راهنماییهای دکتر کاملی، دکتر احمدوند، دکتر رنجبر، دکتر محمدیزاده، دکتر راستی و دکتر صندوقچی سپاسگزاری میشود.



- [1] S. Pinol and O. Castano; "Water vapour pressure influence on the kinetics of the superconducting YBCO thin films epitaxic growth by the TFA-MOD method", Physica C: Superconductivity ٤٥٦ (٢٠٠٦)٤٨-٥٥.
- [Y] P. Vermeir, J. Feys, J. Schaubroeck, K. Verbeken, M. Backer, and I. Van Driessche, "Controlled crystal orientation in fluorine-free superconducting YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-5</sub> films", Materials Chemistry and Physics • YY (Y• YY) 99A-1••Y.
- [<sup>\*</sup>] Y. Xu, A. Goyal, J. Lian, N. Rutter, D. Shi, S. Sathyamurthy, M. Paranthaman, L. Wang, P. Martin, and D. Kroeger, "Preparation of YBCO Films on CeO2-Buffered (001) YSZ Substrates by a Non-Fluorine MOD Method", Journal of the American Ceramic Society AV (Y···) 1119-11V1.

[٤] راستی، محمد؛ "ساخت لایه های نازک ابررسانای YBCO جهت استفاده در فیلتر مایکروویو". پایان نامه دکتری، دانشکده فیزیک، دانشگاه تهران،۱۳۹۹.

- [°] C. Apetrii, et al. "YBCO Thin Films Prepared by Fluorine-Free Polymer-Based Chemical Solution Deposition" IEEE 1° (1...) 11£1\_11£1.
- [7] R. Ramesh, A. Inam, T. Sands, and C. Rogers, "Thin film Y-Ba-Cu-O high Tc superconductors: structure-property relationships", Materials Science and Engineering 14 (1997) 16A-717.



شناسایی تک مولکول گاز بر پایه گرافن تحت تنش کرم بیگی ، زهرا<sup>۱</sup> ؛ ناجی دومیرانی، جلیل<sup>۱</sup> ؛ قاسمیان، خدیجه<sup>۱</sup> <sup>ادانشکاده علوم پایه دانشگاه ایلام ، بلوار پژوهش ، ایلام</sup>

چکیدہ

بالاترین سطح عملکرد در کاربردهای اندازه گیری برای حسگرهای گازی به شناسایی تک مولکولها نسبت داده می شود. بنابراین می توان از گرافن تک لایه در حسگرهای گاز استفاده کرد. در این مطالعه، طبق دانش و اطلاعات ما، اعمال کرنش تک محوری و جذب مولکول گاز منجر به ایجاد شکاف در نوار انرژی گرافن می شود. همچنین در این مطالعه دریافتیم که تحت تأثیر اعمال کرنش تک محوری و جذب مولکولهای ناخالص بر روی گرافن تک لایه، دامنه پرش بین مولکولهای گاز و گرافن و همچنین ویژگیهای الکتریکی و فیزیکی گرافن می تواند تغییر کند. در این مقاله از مولکول گاز که به طور خاص از CO، استفاده شده است که جذب این مولکول گازی با تبدیل چگالی الکترونی گرافن، یک شکاف انرژی ایجاد می کند. مقدار شکاف انرژی به جذب حتی یک مولکول گاز نه به طور خاص از CO، استفاده شده است که جذب باعث می شود که گرافن بعنوان یکی از بهترین گزینهها برای استفاده در حسگرها مورد توجه باشد. واژه های کلیدی: گرافن، تش تک محوری، مولکول گاز، حسگر گاز، استفاده در حسگرها مورد توجه باشد.

#### Single gas molecules detection based on strainedgraphene

Karambyge, Zahra<sup>1</sup>; Naji, Jalil<sup>1</sup>; Ghasemian, Khadijeh<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Factuly of science, University of Ilam, Ilam

#### Abstract

The highest level of performance in measurement applications for gas sensors is attributed to mono molecules detection. Therefore, mono-layer graphene can be used in gas sensors. In this study, to our knowledge, applied uniaxial strain and then adsorbing gas molecule on single-layer graphene opened an Energy band gap in this matter. Also, in this study, we found that the affect of uniaxial strain and absorption of impurity molecules on single-layer graphene changes the hopping amplitude between gas molecules and graphene, and also changes the electrical and physical properties of graphene. In this paper, one can use a gas molecule more specifically, CO, that this gas molecule can create an energy gap by modifying the electron density of graphene, and can open more bandgap. Also, we found that energy gap sensitivity to adsorbing even one gas molecule allowed graphene to become essential to be one of the best options for applying sensors. Keywords: Graphene; Uniaxial strain; Gas molecule; gas sensor

گرافن به عنوان یک نانوساختار جدید، یک لایه منفرد از اتمهای کربن است که به میزان وسیعی در زمینه سنسورهای گازی مورد مطالعه قرار گرفته که دلیل آن ساختار دوبعدی، رسانایی بالا و سطح ویژه بزرگ این ماده است[۱،۲]. حتی جذب تعداد کمی الکترون نیز میتواند باعث تغییر در رسانایی گرافن شود [۱، ۳، ٤، ٥، ٦]. این ماده یک نیمه هادی بدون شکاف نواری است که قادر به

مقدمه



گزینندگی مناسب نمایان میگردد[۱۱]. علاوه بر این، حسگرهای کرنش مبتنی بر گرافن به دلیل کاربرد بالقوه آنها در سنسورهایی با کرنش کوچک و قابلیت بالا توجه زیادی را به خود جلب کردهاندکه این امر محدودیتهای سنسورهای قدیمی تر مبتنی بر سیلیکون را از بین میبرد[۸]. از ایسن رو، برای استفاده از گرافن در دستگاههای الکترونیکی و فوتونیکی، نیاز به شکاف در نوار انرژی داريم چراكه شكاف براي كنترل خواص الكترونيكي اين دستگاهها مورد نیاز است[۱۲]. روش های مختلفی برای ایجاد شکاف انرژی قابل کنترل در گرافن وجود دارد، مانند ايجاد ميدان الكتريكي، كرنش تك محوري، افزودن ناخالصی های شیمیایی و غیره[۱۳، ۱٤، ۱۵، ۱۹، ۱۷]. انتظار می رود این حسگرها در آینده در بسیاری از حوزه های تحقيقاتي مورد استفاده قرار گيرند. از جمله كاربردهاي آن می توان به صفحه نمایش های لمسی اشاره کرد که از شفافیت خوبی برخوردارند. در یک مطالعه توزیـع کـرنش تک محوری در گرافن منجر به باز شدن شکاف انرژی شد[۱۸]. در سال ۲۰۲۰ میلادی، یک مدل تحلیلی برای شناسایی مولکولهای گاز بکار برده شد که در آن از یک بستر گرافنی (FET) به منظور شناسایی NO2 ،H2O و CO استفاده شد[۱۹]. در تحقیق حاضر مشخص شد که رابطه پراکندگی انرژی برای گرافن زمانی که مولکول گاز در ساختار باشد تغییر می کند. در این تحقیق طیف انرژی با اعمال کرنش تک محوری به دست آمده و سیس تاثیر جذب گاز بر روی طیف انرژی در این مورد بررسی شده است.

#### مدل و روش کار

مدل تنگ بست قوی نزدیکترین همسایه روشی معمول برای مطالعه ساختار نواری گرافن است. در گرافن معمولی سه دامنه پرش نزدیکترین همسایه با  $(t_1 = t_2 = t_3)$ مطابقت دارند. فرض کنید یک کرنش تک محوری در امتداد محور X اعمال شده که منجر به تغییر در زاویه بین بردارهای شبکه و طول پیوند می شود، از این رو، یکی از

نزدیکترین دامنه های پرش تغییر یافته که می توان به  
صورت 
$$t_{\gamma} = t_{\gamma} \neq t_{\gamma}$$
 تعریف کرد. بنابراین:  
(۱)  
$$H = -\sum_{n,i,j} \left[ t_n \left( a_i^{\dagger} b_j + b_j^{\dagger} a_i \right) \right], n, i, j = 1, 2, 3, i \neq j$$

که در این رابطه، کمیتهای

$$b_{i+\delta}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{\frac{n}{r}}} \sum_{k'} e^{ik'(r_i+\delta)} b_{k'}^{\dagger}$$

$$a_i^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{\frac{n}{r}}} \sum_{k'} e^{ik'r_i} a_k^{\dagger}$$
(Y)

تعریف شدهاند. با استفاده از تابع دلتا (δ)، و ًk=k . ...

$$\sum_{i \in A} e^{i(k-k')r_i} = \frac{N}{\tau} \delta_{kk'}$$

معادله فوق به دست می آید. بر اساس مدل تنگ بست می -توان هامیلتونین را برای گرافن به صورت زیر نوشت:  $H = \sum_{n,\delta,k} t_n (e^{-ik.\delta} a_k^{\dagger} b_k + e^{ik.\delta} b_k^{\dagger} a_k)$ (٤)

### و می توان آن را به صورت ماتریسی بیان کرد: $H = -\sum_{i} t_{i} \begin{pmatrix} \cdot & e^{ik\cdot\delta_{i}} \\ e^{-ik\cdot\delta_{i}} & \cdot \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \cdot & \sum_{i} t_{i}e^{ik\cdot\delta_{i}} \\ \sum_{i} t_{i}e^{-ik\cdot\delta_{i}} & \cdot \end{pmatrix}$ (٥) $H = -\sum_{i} t_{i} \begin{pmatrix} e^{-ik\cdot\delta_{i}} \\ e^{-ik\cdot\delta_{i}} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} e^{ik\cdot\delta_{i}} \\ \sum_{i} t_{i}e^{-ik\cdot\delta_{i}} \\ e^{-ik\cdot\delta_{i}} \end{pmatrix}$ (٢) $H = -\sum_{i} t_{i}e^{ik\cdot\delta_{i}} + \sum_{i} t_{i}e^{-ik\cdot\delta_{i}} + \sum_{i} t_{i}e^{$

با توجه به اینکه زاویه بین بردارهای پایه θ است، می توان نوشت:

$$E = \pm \begin{pmatrix} t^{\tau} \left( 1 + \cos\left(\tau k_{y} \sqrt{r}a \sin\left(\frac{\theta}{\tau}\right)\right) \right) + \\ t^{\tau}_{\tau} + \tau t t_{\tau} \left( \cos\left(k_{x}a \sqrt{r} \cos\left(\frac{\theta}{\tau}\right) - k_{y}a \sqrt{r} \sin\left(\frac{\theta}{\tau}\right) \right) \right) + \\ \cos\left(k_{x}a \sqrt{r} \cos\left(\frac{\theta}{\tau}\right) - k_{y}a \sqrt{r} \sin\left(\frac{\theta}{\tau}\right) \right) \end{cases}$$

$$(7)$$

که در آن *st* دامنه پرش تحت تأثیر کرنش است و t نشان دهنده دو دامنه پرش دیگر است که تحت کرنش تک محوری بدون تغییر هستند. علاوه بر این، با فرض اینکه تنش در امتداد طول پیوند C-C، اعمال شود، بردارهایی که نزدیک ترین همسایگان را به هم متصل میکنند افزایش و t کاهش مییابد[۱۹]. در کرنش یکنواخت، زاویه بین بردارهای شبکه تغییر نمیکند و فقط مقادیر t به طور یکسان تغییر میکنند. هنگامی کرنش اعمال شده یکنواخت باشد، سه پیوند تغییر طول یکسان دارند و تقارن ساختار شکسته نمی شود[٤]. به دلیل ساختار الکترونیکی، گرافن

می شود که به اینصورت خواص فیزیکی و مکانیکی گرافن را می توان اصلاح کرد [۱۱]. زاویه بین بردارهای شبکه را به دست آورده که به میزان، ٤٤ درجه محاسبه شده است [۲۳]. همانطور که در شکل (۱) مشاهده می شود، شکاف انرژی در جهت کرنش اعمال شده ایجاد که مربوط به تبديل هندسه شبكه و اعوجاج تقارن شبكه است كه منجر به تغییر طیف انرژی میشود. با تغییر مقدار کرنش تک محوری می توان  $\theta$  و  $t_{\pi}$  را تغییر داد، بنابراین این تغییرات منجر به ایجاد شکاف می-شود و یا گاهی با توجه به میزان كرنش اعمالي، تأثيري روى شكاف ندارنـد. مطابق شـكل (٢)، جذب مولكول گاز (به طور خاص، CO) با تبديل چگالی الکترونی گرافن، یک شکاف انرژی ایجاد میکند. همچنین، با مقایسه جذب گاز روی گرافن قبل و بعد از تأثیر کرنش [۱۹] ، متوجه شدیم که مقادیر کرنش بر مقدار شکاف انرژی ایجاد شده در نقاط دیراک تـ أثیر مـی گـذارد. واضح است که هر چه کرنش اعمال شده و زاویـه بـین بردارهای شبکه تقریباً بیشتر باشد، مقدار شکاف و حساسیت سنسور گاز را می توان افزایش داد.در شکل (۳)، نمودار A جذب گاز CO بر روی گرافن را تحت کرنش تک محوری و در نمودار B، جذب گاز CO بر روی گرافن معمولی نشان داده شده است. همانطور که از شکل مشخص است جذب گاز باعث ایجاد شکاف بسیار کوچک در پراکندگی انرژی میشود که میتوان آن را نادیده گرفت و درنتیجه کرنش بر ویژگی گرافن تأثیری نداشته و دقت و حساسیت حسگرها قبل و بعد از اثر كرنش يكسان است.

شکل۱: تغییر شکاف انرژی گرافن تحت کرنش تـک محـوری (محـور x)



گزینه خوبی برای استفاده در حسگر گازی است. از این رو، تغییر اندک در حاملهای بار به طور قابل توجهی بر هدایت الکتریکی تأثیر می گذارد. اساس حسگرهای گازی بر پایه تغییر هدایت الکتریکی ناشی از جذب مولکول گاز هستند[۳]. با توجه به تأثیر کرنش و جذب مولکول گاز بر گرافن، می توان نوشت: (۷)  $([a_i^{\dagger}b_{i+\delta_i} + b_{i+\delta_j}^{\dagger}] + ([a_i^{\dagger}b_{i+\delta_j} + b_{i+\delta_j}^{\dagger}]) + ((t)$ 

+(a<sup>\*</sup><sub>k</sub>a<sup>\*</sup><sub>k</sub>E.+b<sup>\*</sup><sub>k</sub>b<sub>k</sub>E.+c<sup>\*</sup><sub>k</sub>c<sub>k</sub>E.) δ بردار همسایه مولکول گاز، t<sub>j</sub> دامنه پرش مولکول گاز و C مربوط به گرافن است. ماتریس هامیلتونی به صورت زیر ارائه میشود:

$$H = -\begin{bmatrix} E \cdot \sum_{j} t_{j} e^{-ik \cdot \delta_{j}} & \cdot \\ \sum_{j} t_{j} e^{-ik \cdot \delta_{j}} & E \cdot t' e^{ik \cdot \delta_{i}} \\ \cdot & t' e^{-ik \cdot \delta_{i}} & E \cdot \end{bmatrix}$$
(A)

مقادیر قطری E و ' E به ترتیب سطح انرژی فرمی قبل و بعد از جذب مولکول گاز هستند. طیف انرژی را بدست می آوریم:

$$E = \frac{1}{r} \left( \left( E_{i}' + rE_{i} \right) \pm \sqrt{\frac{\left( E_{i}' + rE_{i} \right)^{r}}{-i \left( rEE_{i} + E_{i}' + t_{r}' + \Delta_{k} \Delta_{k}^{*} \right)}} \right)^{(\mathbf{q})}$$

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \sum_{i} \mathbf{t}_{i} e^{i\mathbf{k} \cdot \delta \mathbf{i}}$$

$$\Delta_{k} \Delta_{k}^{*} = \mathsf{rt}^{\mathsf{r}} \left( 1 + \cos\left(\mathsf{rk}_{y} \sqrt{\mathsf{ra}} \sin\left(\frac{\theta}{\mathsf{r}}\right)\right) \right)$$

$$+ t_{\mathsf{r}}^{\mathsf{r}} + \mathsf{rt} t_{\mathsf{r}} \left( \cos\left(k_{x} \sqrt{\mathsf{ra}} \cos\left(\frac{\theta}{\mathsf{r}}\right)\right) - k_{y} a \sqrt{\mathsf{ra}} \sin\left(\frac{\theta}{\mathsf{r}}\right) \right)$$

$$+ \cos\left(k_{x} \sqrt{\mathsf{ra}} \cos\left(\frac{\theta}{\mathsf{r}}\right) - k_{y} a \sqrt{\mathsf{ra}} \sin\left(\frac{\theta}{\mathsf{r}}\right) \right)$$

$$(11)$$

مقدار t = 2/7 eV است که در آن  $t_{\tau}$  کمتر از این مقدار است که تحت تأثیر کرنش تک محوری قرار گرفته و 't دارای مقدار متفاوتی بر اساس ماهیت مولکول گاز است. در مورد گرافن، در غیاب مولکول گاز، مقدار 'tمساوی صفر است (0 = t). با توجه به اینکه، گرافن دارای شکاف انرژی قابل کنترل است، میتوان از آن برای شناسایی هر مولکول گاز استفاده کرد.

نتيجه گيرى

نتایج نشان میدهد که رفتار نیمهفلزی گرافن معمولی در اثر کرنش تک محوری تغییر یافته و شکاف انرژی ایجاد





[5] Liu, Y., Dong, X., & Chen, P. (2012). Biological and chemical sensors based on graphene materials. *Chemical Society Reviews*, **41**(6), 2283-2307.

[6]Shao, Q., Liu, G., Teweldebrhan, D., Balandin, A. A., Rumyantsev, S., Shur, M. S., & Yan, D. (2009). Flicker noise in bilayer graphene transistors. *IEEE Electron Device Letters*, **30**(3), 288-290.

[7] Zhao, J., Zhang, G. Y., & Shi, D. X. (2013). Review of graphene-based strain sensors. *Chinese Physics B*, 22(5), 057701.

[8] Lee, C., Wei, X., Kysar, J. W., & Hone, J. (2008). Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene. *Science*, **321**(5887), 385-388.

[9] Roldán, R., Castellanos-Gomez, A., Cappelluti, E., & Guinea, F. (2015). Strain engineering in semiconducting two-dimensional crystals. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 27(31), 313201.

[10] Sahu, S., & Rout, G. C. (2017). Band gap opening in graphene: a short theoretical study. *International Nano Letters*, **7**(2), 81-89.

[11] Hwang, I. S., Kim, S. J., Choi, J. K., Choi, J., Ji, H., Kim, G. T., ... & Lee, J. H. (2010). Synthesis and gas sensing characteristics of highly crystalline ZnO–SnO2 core–shell nanowires. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 148(2), 595-600.

[12] Zhou, S. Y., Gweon, G. H., Fedorov, A. V., First, P. D., De Heer, W. A., Lee, D. H., ... & Lanzara, A. (2007). Substrateinduced bandgap opening in epitaxial graphene. *Nature materials*, **6**(10), 770-775.

- [13] Chen, Y. C., De Oteyza, D. G., Pedramrazi, Z., Chen, C., Fischer, F. R., & Crommie, M. F. (2013). Tuning the band gap of graphene nanoribbons synthesized from molecular precursors. ACS nano, 7(7), 6123-6128.
- [14] Son, Y. W., Cohen, M. L., & Louie, S. G. (2006). Energy gaps in graphene nanoribbons. *Physical review letters*, **97**(21), 216803.
- [15] Jariwala, D., Srivastava, A., & Ajayan, P. M. (2011).

Graphene synthesis and band gap opening. *Journal of nanoscience and nanotechnology*, **11**(8), 6621-6641.

[16] Xia, F., Farmer, D. B., Lin, Y. M., & Avouris, P. (2010). Graphene field-effect transistors with high on/off current ratio and large transport band gap at room temperature. *Nano letters*, **10**(2), 715-718.

[17] Zhang, Y., etal. (2009). Direct observation of a widely tunable bandgap in bilayer graphene. *Nature*, **459**(7248), 820-823.

[18] Sarker, M. S., Islam, M. M., & Islam, M. R. (2014, February). An analytical approach to study energy band structure in strained graphene. *(EICT)* (pp. 1-5).

[19] Hosseingholipourasl, A., Hafizah Syed Ariffin, S., Al-Otaibi, Y. D., Akbari, E., Hamid, F. K., Koloor, S. S. R., & Petrů, M. (2020). Analytical approach to study sensing properties of graphene based gas sensor. *Sensors*, **20**(5), 1506.

[20] Yang, G., Li, L., Lee, W. B., & Ng, M. C. (2018). Structure of graphene and its disorders: a review. *Science and technology of advanced materials*, **19**(1), 613-648.

[21] Pereira, V. M., Neto, A. C., & Peres, N. M. R. (2009). Tightbinding approach to uniaxial strain in graphene. *Physical Review B*, **80**(4), 045401.

[22] Sahalianov, I. Y., Radchenko, T. M., Tatarenko, V. A., Cuniberti, G., & Prylutskyy, Y. I. (2019). Straintronics in graphene: Extra large electronic band gap induced by tensile and shear strains. *Journal of Applied Physics*, **126**(5), 054302.

[23] Hossain, D., Siddiq, A. B., Sarker, S., Islam, M. M., & Islam, R. (2015, December). An approach to determine bandgap energy in graphene under shear strain condition. *(EICT)* (pp. 428-431). IEEE.



شــکل ۲: تغییـر شکاف باند انرژی ورق گرافن پـس از جذب مولکول گاز هدف



شکل ۳: نمودار A: پراکندگی انرژی برای جذب گاز CO بر روی گرافن تحت کرنش تک محوری. نمودار B: پراکندگی انرژی برای جذب گاز

CO بر روی گرافن معمولی به عنوان تابعی از بردارهای موج افقی و عمودی، (نمودارهای زرد-سبز انرژی مثبت و نمودارهای آبی انرژی منفی را نشان میدهند) (نمودار بالا). پراکندگی انرژی برای جذب گاز

CO بر روی گرافن با و بدون کرنش به عنوان تابعی از بردار موج افقی (نمودار پایین) نوار انرژی گرافم بعد از جذب گاز. {رنگ آبی: در



#### مرجعها

[1] Yuan, W., & Shi, G. (2013). Graphene-based gas sensors. *Journal of Materials Chemistry A*, 1(35), 10078-10091

[2] Pumera, M., Ambrosi, A., Bonanni, A., Chng, E. L. K., & Poh, H. L. (2010). Graphene for electrochemical sensing and biosensing. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, **29**(9), 954-965.

[3] Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D. E., Zhang, Y., Dubonos, S. V& Firsov, A. A. (2004). Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, **306**(5696), 666-669.

[4] Ratinac, K. R., Yang, W., Ringer, S. P., & Braet, F. (2010). Toward Ubiquitous Environmental Gas Sensors Capitalizing on the Promise of Graphene. *Environmental science & technology*, **44**(4), 1167-1176.





### تاثیر فرآیند تولید بر چقرمگی سرامیک آلومینا خادمیان ، نیمان ؛ آسیابی، مینا ' شرکت سایکو، اتوبان مخصوص ، تهران ۲ دانشکده شیمی، دانشگاه خواجه نصیرالدین طوسی، تهران

**چکیدہ** اکسید آلومینیوم (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) مهمترین مادہ فنی گروہ سرامیکهای اکسیدی است که برای کاربردهای مختلف مناسب است. سرامیک آلومینا تف جوشی شدہ متراکم با چقرمگی شکست کم و سختی بالا، پایداری دما، مقاومت در برابر سایش خوب، مقاومت در برابر خوردگی در دماهای سعتی باد، پایداری دما، معاومت در برابر سایس موب، معاومت در برابر محوردیی در دماهای بالا و زیست سازگاری عالی مشخص می شود. به منظور بهبود چقرمگی آلومینا، کامپوزیت های سرامیکی-سرامیکی در بسیاری از کاربردهای مهندسی توسعه یافته اند. خواص این مواد توسط ریزساختار آنها تعیین می شود. بنابراین، برای کنترل توسعه ریزساختاری آنها و دستیابی به ریزساختارهای خوب، تف جوشی، پارامترهای اندازه دره و فرآیند تولید باید بهینه شوند.در این تحقیق سرامیک آلومینا به سه روش: ریخته گری دوغابی، پرس و روزنرانی با هدف بهبود خواص مکانیکی تولید شد و چقرمگی شکست فرورونده (K<sub>C</sub>) بامعرفی یک رابطه شبه تجربی جدید بر اساس طول تخمین ترک اندازه گیری شد. واژه های کلیدی: سرامیک، آلومینا، چقرمگی .

#### The effect of production processes on the toughness of alumina ceramics

Khademian, Nima<sup>1\*</sup>; Asiabi, Mina<sup>2</sup>

<sup>1</sup> SAPCO, Makhsoos road, Tehran <sup>2</sup> Department of Chemistry, Khajeh Nasir al-Din Toosi University of Technology (KNTU), Tehran

#### Abstract

Aluminum oxide  $(Al_2O_3)$  is the most important technical material of the oxide ceramics group, suitable for various applications in the electrical, electronic, chemical, physical and medical industries. Densely sintered Alumina ceramics is characterized by low fracture toughness and high hardness, temperature stability, good wear resistance, corrosion resistance at elevated temperatures and excellent biocompatibility. In order to improve the alumina toughness, ceramic-ceramic composites are being developed into many engineering applications. The properties of these materials are determined by their microstructures; therefore, to control their microstructural development and achieve fine microstructures, the sintering, particle size parameters and production process must be optimized. In this research, alumina ceramics were produced in three methods: slip casting, pressing and extrusion, with the aim of improving the mechanical properties, the indentation fracture toughness  $(K_c)$  was measured by introducing a new quasi-experimental relationship based on estimated cracklength.

Keywords: Ceramics, Alumina, Toughness

PACS No.

الومينيوم دو سوم از بينابينیهای  $Al^{3+}$ مےکنند. هر هشت گـوشی را پـر ا ز گـو شـى نظر است. مركز هشت بلورسناسی، کوراندوم یک شبکه سه گوشی با یک گروه فضایی R3c اتخاذ می کند. اکسید آلومینیوم با نقطه ۲۰۷۲ در سایر فازهای ذوت°C فرایایدار، از جمله فازهای γ و η

مقدمه پرکاربردترین ماده ومننا ٦ĩ سرامیکی اکسیدی است و به طور طبیعی چندشکلی بلوری α-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> به در ف\_از عنوان کوراندوم معدنی از نظر ترمودینامیکی پایدار است. یونهای اکسیژن یک ساختار تقریباً شش گوشی HCP را تشکیل می دهند که یون های



مکعبی، فاز θ بلور تک شیب، فاز χ شش گوشی، فاز κ بلور راست لوزی و فاز که میتواند چهار گوشی یا متعامد  $\delta$ باشد، وجود دارد. کاربردهای آن در مهندسی و زیست یزشکی گسترده است. اخيراً مواد مركب زمينه آلومينا (AMC) با خواص مکانیکی و سایش شنا سی عالی برای بیوسرامیک و ایمپلنت معرفی شده اند و با تقویت کننده رشته ای و یا با افزودنی هایی مانند زیرکونیا، جلوگیری از شكست ناگهاني و القاي رفتار شبه داکتیل در آنها مشاهده می شود. تحقیق جهت ایجاد این خواص در سرامیک ها با توسعه فرآیندهای نوین نیز در حال انجام است. از چالش های روش اندازه گیری چقرمگی مهم سرامیک ها است که خواص مکانیکی آنها را نشان می دهد و در اینجا مورد بررسی قرار می گیرد[۱-٤]. روش آزمایش و محاسباتی

در ایـــن تـحقـيــق آلومينــای مونولیتیک با خلوص حدود ۹۹.۸۶ (جدول ۱)بـا سـه روش توليـد ريختـه گـرى تعلیقی، پرس و روزنرانی تولید شد. سپس نمونه ها در دمای°C ۰۰ به مـدت ۱۲ ساعت خ شک شدند. و عملیات تف جوشی با نرخ افزایش دمای C°/min تا دمای°C ، نگهداری در ایـن دمـا بــه مــدت ۱ سـاعت و بــه دنـبـال آن افــزایش دمــا بـا نــرخ C°/min ه تـا دماهای ۱۲۰۰ و ۱۲۰۰ و ۱۲۰۰ درجه سانتیگرادو نگهداری به مدت ۲ ساعت و در نهایت خمنک شدن آهسته در کوره تا دمای اتاق انجام گردید. توزیع اندازه ذره سه قله ای با ابعـاد μm ه،μm ۱ و ۱۰۰ nm انتخاب شـد. پـس از تف جو شی، چگالی ار شمیدس برای همه نمونه ها اندازه گیری شد، سپس چقرمگی بر اساس رابطه نیمه تجربی اندازه گیری گردید.

	ومينا	بایی آل	ب شيم.	تىركىد	جدول۱ :	
Component	MgO	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	SiO <sub>2</sub>	Na <sub>2</sub> O	CaO	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
wt. %	۰٦٥	۰. ۰ ۱ ٤	۰.۰٤	۰.۰٥	•.•١٣	Balance

چگالی نمونه های ریختگی ۱، و پرس ۲ و روزنرا نی ۳ با تغیییرات دما در شکل ۱ نشان داده شده است. با افزایش د مای تف جو شی، چگالی نمونه ها افزایش یافته ضمن اینکه بیشترین چگالی در نمونه روزنرانی مشاهده می شود.



شکل ۱: نمودار چگالی بر حسب دمابرای سه نمونه ریختگی، پرس و روزنرانی

برای تعیین چقرم گی شکست ه مه نمونــه های سـرامیکی از روش شکسـتگی فرورفتگی ویکرز VIF یا بعبارتی طول ترک فرورفتگی ویکرز VICL استفاده شد. فرورفتگی یک ناحیه تغییر شکل پلاستیکی در زیر تورفتگی ایجاد می کند و همچنین شکاف هایی را ایجاد می کند که به صورت شعاعی به سمت بیرون و پایین از ر ئوس فرورفت گی ویـ کرز بـ یرون می آیـ ند. علاوه بر ترکهای شیعاعی-میانیه ، ترکهای يالمكويســت نيــز مـــىتوانـنــد رخ دهند (شـکل ۲). یـک راه سـاده بـرای تـمایـز بـین ایـن دو نـوع، صیقـل دادن لایه های سطحی است. ه مانطور که در شکل ۱ نـشان داده شده است، سیـستم ترک میا نه همید شه به هرم مع کوس فرورفتگی متصل می ماند در حالی که ترک های یالمکویست جدا می شوند. علاوه بر این دو روش اندازه گیری چقرم گی مواد ترد، روش سوم برازش منحنی و روش چهارم بر مبنای سطح اثــر تــرک مــی باشــد. در دو روش ابتدایی ضریب نید مه تجربی معادلات با آزمایشات تجربی و راهکار ریاضی حاصل می شوددر حالیکه در روش سوم علاوه بر آن از سعی و خطا و مقایسه \_\_\_ روش ه\_\_ی SEPB ، SCF ، ISB ، SENB ، SCF CNB و DCB نیز استفاده می شود. روش

Toughness



چهارم بر اساس ضخامت و سطح اثر ترک می باشد.  $a_{a}$  باشد.  $a_{a$ 

شکل ۲: ترک میانه و پالمکوئیست

نوع ترک نشانگر غیر مستقیم چقرمگی مواد است، بعبارتی مواد با ترک پالمکوئی ست چقرم گی بالاتر از مواد با ترک شعاعی-میانه دارند. نمونه هایی با نسـبت c/a بـین ۲۰۰ و ۳.۰ نـشان دهنده وجود هر دو نـوع تـرک پالمکویست و میانیه هستند. ترک یالمکوئیســت c/a<۲.o دارد[٤]. چنـین ترکهـایی در نتیجـه تنشهـای کششـے، بــاقـیمانــده در حــین بارگــذاری و تخلیه ایجاد می شوند، از فرورفتگی خارج می شوند. رابطه بین نیروی بارگذاری دندانه و طول ترک خطی فرض مے، شود. این یک رابطہ تجربی بدون زیر ساخت نظری است اما نشان دهنده ارتباط نزدیک با خواص مکانیکی مواد آزمایش شده است. یک ناحیه پلاستیکی در زیر فرورفتگی مطابق با حالت الاستیک-پلاستیک ایـجاد می شود. چهار مورفولوژی میکروترک در سرامیک ها ایجاد مـے شـود. ترکھای میانی، ترکھای شعاعی یا بیضی شکل نیم پنی که معمولا بزرگتر از ترک های میانی است، ترک های جانبی که در یک صفحه هنجـار نسـبت بــه تـركهـاى ميـانـى و شـــعاعی قـــرار دارد و تـرکهــای پالمکویست از شناخته شده ترین آنها هســـتند. محاســبه چقرمگــی شکســت فرورفتگی با بیش از ۲۰ معادله تنوع زیادی دارد. مـدلهای Casellas، Tanaka Evans- ، Miyoshi ، Niihara ، Lankford ، Anstis Charles برای محاسبه چقرمگی مواد ترد از پرکــاربردترین هـا هســتند[۴].

م شکلات تجزیه و تحلیل تنش منجر به بر خی نا سازگاری در فر مول های به دست آمده برای محاسبه چقرمگی شکست فرورفتگی شده است.

به منظور محاسبه چقرمگی شکست فرورفتگی ویکرزHV30، طول ایان تارک هـا بـا نـرم افـزار تحليـل تصـوير اندازه گیری شد. در اینجا روش پنجم اندازه گیری چقرمگی فرورونده معرفی می گردد که خطا های نرخ بارگذاری، ناخالصی، تخلخل، تـرک جـانـبی، پـیش ترک، ترک زیگزاگ، ترک زیر بحرانی و پلیسه ترک را در نظر می گیرد. در واقع این روش با توزیع میدان تنش-کــرنـش در شــبیه سـازی مــرتـبط اسـت. روش های مبتـنی بر اندازهگیری طول ترک توسط فرورفتگی ویکرز این مزیت را دارند که استفاده از آنها آسان است، ولی به دلیل د شواری در تعیین طول دقیق ترک ها، بسیار غیر قابل اعتماد هستند. معادله شبه تجربی با ضریب تصحیح هندسه ترک در شبیه سازی معرفی می گردد:

 $K_{C} = c_{e} (F/C_{R}^{1.5})(E/HV)^{0.5}$ ,  $C_{R} = C_{M} + C_{S}/2$  (1)

لعنایج در سحل ۲ حسان داده سده است. با افزایش دما به دلیل افزایش چگالی و کاهش تخلخل نمونه ها، افزایش چقرمگی مشاهده می شود. از طرفی چقرمگی در نمونه های روزنرانی شده بیشتر از سایر روش های تولید است که ناشی از تراکم بالاتر این فرآیند تولید است که به دلیل بکار گیری فشار نسبت به ریخته گری تعلیقی و همچنین رطوبت بالاتر نسبت به فرآیند یرس است.





شکل ۳: نمودار چقرمگی بر حسب دمابرای سه نمونه ریختگی، پرس و روزنرانی

مقادير حدود د ر چترمگی بيشترين  $MPam^{1/2}$ شد ٥.٤ 7.8 حد و د کـه محاسبه هـا ی روش ا ز. بــا لاتــر د ی محاسبه 1 باشد.

#### نتيجه گيرى

افـز ايـش جـو ش د مــا ی تف L چگالی برای و نے چترم 4 هـمـ . -افزايش چترمگی ابد. مـى ر يـن ش \_ر ان\_ روزن فرايند ب\_ر ای L حـا س 9 (5 مقاد شـد ہ معرف معادله همچنین (5 را اساس تـوزيـع نـش ت ميدان ڃترم (5 مقادير روش چهار از كرنش بيشتر نمايد به دلیل کے بينى يـيش دىگر مـى گرفتن افزايش نظر د ر 1 دقت م\_ ، تـرک ا ر ا ز ï ش یارامترهای قبل هـا ی ر و ش د ر کـه بــا شـد موجود نيست.

#### مرجعها

- [1] G.D,Quin, J.Salem,I.K.Cho, M.Foley, H.Fang, "Fracture Toughness of Advanced Ceramics at Room Temperature", J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol. 97,579 (1992).
- [Y] A. G. Al-Amin, S. R. Sarker, Z. Alam., "Structural and Mechanical Properties of Alumina-Zirconia (ZTA) Composites with Unstabilized Zirconia Modulation", *Materials Sciences and Applications*. 12, (2021) 542-560.
- [r] H. C. Hyun, F. Rickhey, J. H. Lee, M. Kim, H. Lee, "Evaluation of indentation fracture toughness for brittle materials based on the cohesive zone finite element method", *Engineering Fracture Mechanics* 134 (2015) 304–316.
- [\*] F.Sergejev, M.Antonov, "Comparative study on indentation fracture toughness measurements of cemented carbides", *Materials Sciences* and Applications. Proc. Estonian Acad. Sci. Eng., **12**, 4(2006) 388– 398.





### ترابرد قابل کنترل با پتانسیل متناوب در گرافین سه لایه با ساختار برنلABA

زینب رشیدیان'\*، نساء احمدزاده

اگروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه لرستان، لرستان، ایران ۲گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آزاد اسلامی همدان، همدان، ایران

چکیدہ

گرافین شبکه دوبعدی اتمهای کرین با ساختار شش گوشی است و در چینش یک تا چندلایه خواص دوبعدی خود را حفظ میکند. گرافین سهلایه به علت پایداری و فراوانی نسبت به دیگر ساختارها، مورد توجه است. چون تعداد و چگونگی قرارگیری لایه انسبت به هم خواص ترابردی ماده و طیف پاشندگی را تغییر می دهد؛ بنابراین در بررسی گرافین سهلایه ساختار برنل ABA به تحلیل هامیلتونی و ساختار نواری آن پرداخته ایم. بررسی ها در حضور پتانسیل متناوب انجام شده است. ترابرد الکتریکی قطعهای از گرافین سهلایه در حضور سد پتانسیل بین دو قطعه نرمال بادون پتانسیل، بررسی شده و نمودار بهنجار شده ی رسانش، از رویکرد لاندائو-بوتیکر تحلیل و ترسیم شده است؛ رسانش بسته به اندازه پتانسیل این دو قطعه نرمال بادون پتانسیل، بررسی شده و نمودار بهنجار شده ی رسانش، از رویکرد لاندائو-بوتیکر تحلیل و ترسیم شده ست؛ رسانش بسته به اندازه پتانسیل اعمالی و طول ناحیه میانی می تواند ماکزیموم و مقدار خود را داشته باشد؛ یعنی با اعمال پتانسیل ترابرد بار کنترل می شود. چون تغییرات رسانش بین صفر و یک نمادی برای کاریرد قطعات نانوالکترونیک در ساخت ترانزیستورهای صنعتی با ابعاد بسیار کوچک است؛ در اینجا به بررسی روش های اعمالی این صفر و یک نمادی برای کاریرد قطعات نانوالکترونیک در ساخت ترانزیستورهای صنعتی با ابعاد وروژه های کلیدی: گرافین سه به به پتانسیلی پرداخته ایم که می تواند با ایجاد سد پتانسیل الکتریکی، رسانش را در محدودی خاصی کندرل کند.

#### Controllable Transport with Staggered Potential in Bernal Stacked ABA Trilayer Graphene

#### Rashidian, Zeinab\*1; Ahmadzadeh, Nesa<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Faculty of Science, Lorestan University, Lorestan, Iran

<sup>2</sup> Department of Physics, Faculty of Science, Islamic Azad University, Hamedan Branch, Hamedan, Iran

#### Abstract

Graphene is a two-dimensional carbon-arranged structure in the hexagonal lattice, can be maintained (from one to several layers)its two-dimensional properties. Trilayer graphene has been studied due to its stability and abundance over other structures.

Considering the type and number of layers and how are placed in relation to each other in the properties of the material, causing a different dispersion spectrum, we will see different transport properties in the structures.

Investigations have been carried out in the presence of staggered potential, because in the analysis of electrical transport we consider a piece of trilayer graphene in the presence of a staggered potential sandwiched between two normal regions without potential.

The electrical transport properties by analyzing the flow diagram, derived from the Landaure-Buttiker approach, indicate that the use of trilayer graphene is applicable in the production and construction of transistors.

Keywords: Trilayer Graphene, Staggered Potential, Conductance, Landaure Buttiker Formula

، نویسنده مسئول: rashidian.z@lu.ac.ir





کربن به عنوان یک عنصر حیاتی رفتارهای غیرمعمول و پیچیدهای در تشکیل ساختارهای گوناگون از خود نشان می دهد، پیش بینی امکان کاربرد ساختار دو بعدی در علم و صنعت در نهایت موجب موفقیت در تولید آن شد؛ به طوری که در سال 2004 گروهی از فیزیکدانان دانشگاه منچستر که به سرپرستی آندره گایم مشغول به تحقیق و فعالیت بودند، توانستند در یک روش نه چندان پیچیده تکلایههای گرافین را به روش شکاف میکرومکانیکی از ساختار گرافیت جدا کنند [ 1, 2, 3].

با توجه به چیدمان و ساختارهای مختلف مشاهده شدهی گرافین که با تغییر در تعداد لایهها و نوع قرار گرفتن آنها به وجود آمده است، میتوان گاف انرژی را با ورود ناخالصیهایی که تقارن شبکه را بر هم میزنند( اعمال پتانسیل متناوب) و یا میدانهای عمودی اعمال شده به طرق مختلف( گیت ثابت پتانسیل)، کنترل بر پایه نیمرساناها نظیر ترانزیستورها قرار داد [5,4]. با توجه به نتایج بدست آمده در این کار، رسانش بسته به اندازه پتانسیل اعمالی و طول ناحیه میانی میتواند ماکزیموم مقدار و مینیموم مقدار خود را داشته باشد؛ یعنی با اعمال پتانسیل الکتریکی در مقابل ترابرد بار را کنترل کرد و با ایجاد سدپتانسیل الکتریکی در مقابل عبور ذرات، رسانش را در محدودهی خاصی کنترل کند.

#### روش کار

در مورد چیدمان برنل( ABA) که مورد مطالعه این مقاله قرار گرفته است، زیرساختار A از لایه اول منطبق و موازی با زیرساختار B از لایه دوم و زیرساختار A از لایه سوم بوده و هر لایه به اندازه  $\frac{\pi}{3}$  حول همین نقاط نسبت به لایه دیگر چرخیده و چیدمانی را به وجود آورده که فاصله صفحات آن کمتر و میزان جفت شدگی صفحات به هم بیشتر شده است[6, 4]. طیف پاشندگی این ساختار طبق پیش بینی گاف نواری صفر دارد و نمودار آن مطابق شکل ۱ نشان داده شده است و در صورت اعمال

بمودار آن مطابق شکل ۲ نسان داده سده است و در صورت اعمان پتانسی می توان در آن گاف قابل کنترلی ایجاد کرد که نمودار مربوط به آن با منحنی خطچین شکل ۱ نشان داده شده است.



از آنجا که مطالعات و کارهای محاسباتی در مورد ساختار و ترابرد گرافین سهلایه AAA درمقالات متعددی انجام شده است[7,6] و همچنین بررسی رسانندگی اپتیکی در گرافین سهلایه با چیدمان ABA نیز مورد تحقیق بوده است[8]؛ در اینجا قصد داریم با رسم ساختار نواری گرافین سهلایه که برهم نهی از سیستمهای گرافین تکلایه و دولایه است، تحلیلی از ترابرد و چگونگی تغییرات رسانش الکتریکی گرافین این چیدمان را مورد بررسی قراردهیم و پیشبینی ما بر این است که با برهمنهی از رفتارهای گرافین تکلایه و دولایه مواجه هستیم.

اعمال پتانسیل متناوب با ورود ناخالصی به ساختار شبکه به گونهای انجام می شود که در هر صفحه تقارن بین دو زیر ساختار A,B را بر هم زده و بر روی زیر ساختار اول پتانسیل V و بر دومی پتانسیلV- قرار می دهد. در بررسی گرافین سه لایه تحت پتانسیل متناوب تقارن لایه اول و سوم را برای ایجاد گاف نواری بر هم میزنیم. به این ترتیب عناصر قطری ماتریس های هامیلتونی فوق مطابق معادله ۱ تغییر کرده و ویژه مقدار آن مطابق روابط۲ خواهد بود [9,10]:

(1)

	(V)	f	0	0	0	0 )
	$f^{*}$	-V	γ	0	0	0
$\mathbf{u}^{s}$ –	0	γ	0	f	0	γ
	0	0	$f^{*}$	0	0	0
	0	0	0	0	V	f
	0	0	γ	0	$f^{*}$	-V



$$\begin{split} E^{S}_{ABA} &= \pm \sqrt{\frac{\gamma^{2}}{2} + f^{2} + V^{2} \pm \sqrt{\frac{\gamma^{4}}{4} + \gamma^{2} f^{2}}} \\ E^{S}_{ABA} &= \pm \sqrt{f^{2} + V^{2}} \end{split} \tag{(Y)}$$

این معادلات طیف نواری را نشان میدهد که از حالت بدون گاف خارج شده و با اعمال این نوع سد پتانسیل قابلیت کنترل گاف انرژی پیدا کردهاند.

(٣)

یکی از مرسومترین روش های بررسی خواص ترابرد در سیستمهای الکترونی بالستیک کپهای، نظریه پراکندگی لاندائو است؛ در بازهی پیوستهای از زوایای فرودی ذرات برخوردی به سیستم گرافینی پراکننده، رسانش طبق رویکرد لاندائو- بوتیکر بهصورت انتگرال پیوستهای نشان داده می شود: [11,12]

 $G = 2G_0 \int_{0}^{\pi/2} T(E,\theta) \cos(\theta) d\theta$ 

برای این منظور مطابق شکل ۲ یک مجموعه سه قسمتی از اتصال گرافین سهلایه با چیدمان برنل با طول L و پهنای W را در نظر می گیریم که قطعه میانی تحت پتانسیل مشخصی قرار گرفته است و بین دو قطعه با چیدمان مشابه اما در حالت نرمال و بدون پتانسیل قرار دارد- اصطلاحاً ساندویچ شده است- سپس با اعمال شرایط مرزی پیوستگی بین توابع موج ورودی و خروجی، در دو مرز L=x, 0=x که در روابط ٤و ٥و ٦ آورده شده است، ماتریس



شکل ۲. اتصال ساختار گرافین سه لایه در حضور پتانسیل بین دو نمونه مشابه نرمال بدون پتانسیل

توابع موج در سه ناحیه گرافینی به شرح زیر می باشد: در ناحیه اول( نرمال):





با محاسبات ضریب عبور و اعمال بر رابطه انتگرالی لاندائو-بوتیکر برای تعیین احتمال عبور حاملان بار از این نوع اتصال



همانطور که میدانیم حضور ناخالصیها روی اتمها میتواند پتانسیلهای موضعی مختلفی ایجاد کند واز طرفی از یافته های این مقاله انتظار داریم جریان قطع به ازای مقادیر مختلف پتانسیل اتفاق بیافتد. پس در واقع موقعیت اتمها نسبت به هم و همچنین حضور ناخالصی ها می تواند روی رفتار ترابردی مواد تأثیر بگذارد و معیاری از تشخیص پتانسیل های موضعی در سطح اتمی باشد.

#### مرجعها

- [1] P. Bayati, Electronic in bilayer graphene nanostructure, (master's thesis). Institute for advanced studies in basic sciences, zanjan, Iran (2010).
- [2] C. J. Tabert, Optical properties of AA-stacked bilayer graphene, (Doctoral dissertation). The University of Guelf, Ontario, Canada (2010).
- [3] P. Dietl, Numerical studies of electronic transport through graphene nanoribons with disorder, (*Diploma thesis*). *The University of Karlsruhe, Germany* (2009).
- [4] M. Koshino, Interlayer Screening Effect in Graphene Multilayer with ABA and ABC Stacking, *Phys. Rev.* B81, 125304 (2010).
- [5] M. G. Menezes, et al, Ab initio quasiparticle bandstructure of ABA and ABC- stacked graphene trilayer, *Physical Review*. **B89** (3),035431 (2014).
- [6] Y. Mohammadi, et al, Effects of Doping and Bias Voltage on the Screening in AAA-Stacked Trilayer Graphene, *Solid state communications* 193, 1-5 (2014).
- [7] I. Redouani, A et al, Multibands Tunneling in AAA-Stacked Trilayer Graphene, *Superlattices and microstructures*. **116**, 44-53 (2018).
- [8] Z. Rashidian, et al, Optical Conductivity of ABA Stacked Graphene Trilayer: mid-IR Resonance Due to Band Nesting. *IOP J. Phys. Condens Matter26*. 395301 (2014).
- [9] S. Chen, Y. H. Su, C. R. Chang, Asymmetric edge modes by staggered potential in honeycomb lattice: spin splitter, *Journal of applied physics* 117,17c705 (2015).
- [10] Z. Rashidian, N. Ahmadzadeh, Considering Effect of Staggered Potential on Conductanse and Berry Phase in Monolayer Graphene, Proceedings of 5<sup>th</sup> International Congress on Nanoscience & Nanotechnology, (ICNN),(2014).
- [11] H. Cheraghi, F. Adinevand, Control over bandstructure and tunneling in bilayer graphene induced by velocity engineering, *Journal of Physics Condens matter*.26. 015302 (2014).
- [12] Y. Hajati, Z. Rashidian, Valley and Spin Resonant Tunneling Current in Ferromagnetic/Nonmagnetic/ Ferromagnetic Silicene Junction, *AIP Advances* 6, 025307 (2016).

سەلايە، نتيجە محاسبات رسانش با رويكرد معادله شماره ۳ نتايج



شکل ۳. تغییرات رسانش از اتصالات گرافین سه لایه در حضور پتانسیل متناوب برای چهار طول مختلف از ناحیه میانی

#### بحث و نتیجه گیری

همانطور که از نمودارهای رسانش و ساختار نواری دیده می شود، رسانش بسته به اندازه يتانسيل اعمالي و طول ناحيه مياني مي تواند ماکزیموم مقدار و مینیموم مقدار خود را داشته باشد؛ یعنی با اعمال یتانسیل متناوب می شود ترابرد بار را کنترل کرد. از آنجا که تغییرات رسانش بین صفر و یک نمادی برای کاربرد قطعات نانوالکترونیک در ساخت ترانزیستورهای صنعتی با ابعاد بسیار کوچک می باشد؛ در این تحقیق به بررسی روش های اعمال پتانسیلی پرداختهایم که می تواند با ایجاد سد پتانسیل الکتریکی در مقابل عبور ذرات، رسانش را در محدودهی خاصی کنترل کند. با توجه به این که گرافین سهلایه با ساختار برنل؛ ساختاری پایدارتر با فراوانی بیشتر در مجموعه آلوتروپهای کربن است، می تواند گزینهای جالب برای این بررسی باشد. چگونگی تغییرات رسانش و کنترل بر گاف نواری ایجاد شده مطابق نمودارهای ترسیم شده در شکل ۳ آورده شده است؛ که نشان می دهد در بازه مشخصی از ولتاژ افت رسانش و سیس افزایش آن را مواجه هستیم. همچنین تناوبی بودن تغییرات رسانش با اعمال پتانسیل متناوب که در شکل ۳ نیز ظاهر شده است که به وسیله تونلزنی کلاین توجیه پذیر است و تأییدی بر حضور این پدیده در ساختار گرافین دارد.





### مطالعه تاثیر تنش و اندازه دانه بر رفتار خزش آلیاژ Zr-1%Nb از طریق شبیه سازی اتمی

باسعادت ، محمدرضا ا

<sup>ا</sup> پژوهشکده فیزیک و شتابگرها، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، سازمان انرژی اتمی ایران، انتهای خیابان کارگر شمالی، تهران

#### چکیدہ

آلیاژ زیرکونیوم با نیوبیوم یکی از مهمترین مواد مورد استفاده در صنعت هسته ای می باشند. این ماده به عنوان غلاف سوخت راکتور ها، تحت تابش، فشار و دمای بالا قرار می گیرد و بنابراین مطالعه آن در دماهای بالا و محیط خشن ضروری بنظر می رسد. در این مطالعه، رفتار خزش این آلیاژ را در در دمای بالا تحت تنش های بزرگ از طریق روش دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار می دهیم و به این ترتیب اثر تنش را بر خزش مطالعه می کنیم. همچنین اثر اندازه دانه را بر روی رفتار خزشی آن بررسی می کنیم. نتایج نشان می دهد که نرخ تغییر شکل این آلیاژ با افزایش اندازه دانه ها کاهش می یابد. همچنین افزایش تنش محوری در ساختار موجب افزایش نرخ تغییر شکل ساختار خواهد شد.

واژه های کلیدی: آلیاژ Zr-1%Nb دینامیک مولکولی، رفتار خزشی، اندازه دانه، تنش محوری

# The study of stress and grain size effect on creep behavior of Zr-1%Nb alloy using atomistic simulation

#### Basaadat, Mohammad-Reza<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Physics and Accelerator Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, AEOI, Tehran.

#### Abstract

Zirconium alloys with niobium are one of the most important materials in nuclear industry. This alloy is under irradiation, pressure, and high temperature as fuel cladding and therefore the study of this alloy is necessary at the high temperature and aggressive environment. In this study, the creep behavior of this alloy at hightemperature is considered under high stress using molecular dynamics approach and accordingly the effect of stress on creep is explored. In addition, the effect of grain size is studied on the creep behavior of Zr-1%Nb alloy. The results are shown that the deformation rate is decreased with increasing the grain size. Furthermore, increasing the uniaxial stress level is caused the greater deformation rate in the structure.

Keywords: Zr-1%Nb alloy, molecular dynamics, creep behavior, grain size, uniaxial stress

PACS No.

برای زیرکونیوم کریستالی سه فاز وجود دارد (شکل ۱): فاز α با ساختار HCP در دمای کمتر از ۸۶۳ درجه سانتیگراد، فاز β با ساختار BCC در دمای بالاتر از ۸۶۳ درجه سانتیگراد، و فاز ω با ساختار شش ضلعی و در حضور فشار هیدرواستاتیک. به عنوان یک پارامتر مهم مربوط به عملکرد مکانیکی، نتایج تجربی در مورد رفتار خزش در دمای بالا وجود دارد. به عنوان مثال هایس و همکارش رفتار خزشی آلیاژهای زیرکونیوم را به صورت تجربی

#### مقدمه

آلیاژهای زیرکونیوم کاربردهای گسترده ای در صنعت هسته ای دارند. آنها دارای نقطه ذوب بالا، جذب نوترون با سطح مقطع کم، مقاومت در برابر خوردگی مناسب در آب و خواص مکانیکی قابل اعتماد هستند و به عنوان مواد ساختاری و پوشش سوخت راکتورهای هسته ای خنک شونده با آب استفاده می شوند [۱].

برای یک دوره فشار محدود در نظر می گیرند [۲]. همچنین کارهای دیگری نیز در این زمینه در مورد زیرکونیوم و سایر ترکیبات مشابه وجود دارد [۳–۵]. پایداری و قابلیت پیش بینی تحولات ساختاری در اجزای آلیاژ زیرکونیومی برای طراحان و اپراتورهای راکتورها مهم است. بنابراین، خواص مکانیکی مانند تغییر شکل خزشی، نحوه عملکرد آن آلیاژ را برای استفاده در راکتورها نشان می دهد. برای بررسی های درون رآکتور، خزش حالت پایدار دیده می شود و به ندرت امکان رسیدن به خزش درجه سوم یا ناپایدار وجود دارد. اما یک استثنا در مورد گم شدن گلوله های سوخت در میله است، که باعث افزایش خزش موضعی

می شود که می تواند وارد مرحله خزش سوم شود [۶]. در این مطالعه، نرخ تغییر شکل در مراحل مختلف خزش برای آلیاژ Zr-1%Nb بررسی شده است. علاوه بر این، اثر تنش در راستای یک محور بر رفتار خزش مورد بررسی قرار گرفته است. همچنین، تأثیر اندازه دانه نیز بر عملکرد خزشی ساختار آلیاژی مورد بحث قرار گرفته است. در نهایت، برای درک بهتر رفتار خزشی در دمای بالا و نحوه تحول و پخش اتمها در ساختار آلیاژ کمیت میانگین فاصله مربعی (MSD) برای تنش ها و اندازه دانه های مختلف در آلیاژ MsD برای تنش ها و اندازه دانه



شکل ۱. فازهای مختلف ساختار زیرکونیوم و آلیاژهای زیرکونیوم-نیوبیوم.

#### تئوری و روشهای محاسباتی

برای این محاسبات سه آلیاژ Zr-1%Nb در اندازه دانه های مختلف با ۱۰، ۳۰ و ۵۰ دانه و به ترتیب با ۱۴۴۷۶۱، ۱۴۴۳۳۸ و

۱۴۴۳۱۱ اتم در هر کدام از ساختارها توسط بسته نرم افزاری Atomsk تولید شده است [۷]. ساختار هندسی یک مکعب از دانه های HCP و ۱۵×۱۵×۱۵ نانومتر در هر جهت و جهت گیری دانه های مختلف است (شکل ۲). اندازه دانه ها در این سه پیکربندی ۲.۱ نانومتر، ۴۸ نانومتر و ۶۰۷ نانومتر است. در شکل هر دانه با رنگ های مختلف متمایز می شود. علاوه بر این، الگوریتم ورونوی [۸] برای تولید این نانوبلورها استفاده شده است. شرط مرزی دوره ای در همه جهات استفاده شده است.

همه شبیهسازی ها از طریق بسته نرم افزاری لمپس [۹] انجام شدهاند. یک پتانسیل بین اتمی دوتایی Zr-Nb [۱۰] برای سیستم در قالب پتانسیل وابسته به زاویه (ADP) استفاده شده است که نتایج نسبتاً دقیقی را برای خواص حرارتی و مکانیکی عناصر خالص و آلیاژهای ترکیب دوتایی بازتولید می کند. علاوه بر این، مرحله زمانی شبیه سازی fs ۱ تنظیم شد. همچنین، از نرم افزار VMD [۱۱] برای تجزیه و تحلیل ساختاری و سایر پس پردازش ها استفاده شده است.

در ابتدا، تمامی بهینه سازی های مربوط به نانوبلور Zr-1%Nb به طور کامل انجام شده است، و سپس شبیهسازی فرآیند خزش با استفاده از آنسامبل NPT انجام شده است که در آن فقط تنش تک محوری ثابت در جهت Z اعمال می شود. شبیهسازیهای خزش برای Ps ۱۰۰ در دمای بالا انجام شدهاند تا بینش عمیقی در رابطه با تحول ساختار بلوری برای فرآیند خزش در دمای بالا ارائه دهند. MSD یک پارامتر قابل توجه برای تجزیه و تحلیل ضریب پخش اتمی در سیستم است و بصورت زیر محاسبه می شود [۱۲]:

 $MSD(t) = \langle r^{2}(t) \rangle = \langle \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N} (r_{i}(t) - r_{i}(0))^{2} \rangle$ (1)

#### نتايج و بحث

در ابتدا برای ارزیابی پتانسیل بین اتمی پارامترهای شبکه زیرکونیوم HCP تک بلوری محاسبه شد که ۳.۱۸۸، ۵.۲۰۶ آنگستروم در جهت X و Z به دست آمده است که در تطابق خوبی با نتایج آزمایشگاهی (۳.۲۳۲ و ۵.۱۴۹ [۱۳]) می باشد. از آنجایی که غالبترین رویدادها در فرآیند خزش، تولید و از بین رفتن جای خالی و خودبین-نشینی است، انرژی تشکیل این نقیصه
ها نیز باید با نتایج چک شده و ارزیابی شود. بر این اساس، انرژی تشکیل تهی جای و خود بین-نشینی برای ساختار زیرکونیوم تک بلوری نیز به ترتیب V۹ ۹.۱ و ۲.۷۶ به دست آمده است که می تواند با نتایج آزمایشگاهی (بزرگتر از V ۱ [۱۴] و V۹ ۷.۷ محاسبات تابعی چگالی [۱۵]) مقایسه شود. بنابراین به طور کلی می توان نتیجه گرفت که این پتانسیل بین اتمی نتایج قابل اعتمادی را در محاسبات ما آماده می کند.



شکل ۲. نانوساختارهای آلیاژ Zr-1%Nb با اندازه دانه های مختلف با ۱۰، ۳۰ و ۵۰ دانه.

در بخش بعدی به شبیه سازی های دینامیک مولکولی خزش می پردازیم. برای این منظور تنش های (از ۸۰ گیگا پاسکال تا ۱.۲ گیگا پاسکال) برای آلیاژ Zr-1%Nb با تعداد دانه های مختلف و در دمای ۹۰۰ کلوین اعمال شده است. فرآیند تغییر شکل خزشی در شکل ۳ نشان داده شده است. رنگ های سبز، صورتی و سیاه به ترتیب فشار ۸۰، ۱.۰ و ۱.۲ گیگاپاسکال را در هر نمودار نشان می دهند.

سه مرحله خزش در شکل ۴ دیده می شود: مراحل خزش اولیه، حالت پایدار و خزش ناپایدار. برای دمای ذکر شده رفتار خزشی این ساختار بیشتر به در مرحله سوم (ناپایدار) دیده می شود. در واقع می توان گفت، در دماهای بالا، دامنه ارتعاش اتمها در ساختار آلیاژ افزایش مییابد به طوری که برخی از اتمها ممکن است در حضور گرادیان فشار بر سد مجاور غلبه کنند و پخش داخلی نقیصه ها را افزایش دهد. این فرآیندهای خزشی در فشار بالا انجام شده اند و به همین دلیل انتظار می رود که برای دمای بالا، مرحله خزش حالت پایدار از بین برود. به عبارت دیگر، افزایش دما به تدریج مرحله مدت زمان حالت پایدار را کاهش می دهد و مرحله

است به دلیل فشار و دمای بالا به سمت نازک شدن (Necking) یا حتی پارگی (Rupture) برود.



شکل ۳. نرخ تغییر شکل ساختار آلیاژ Zr-1%Nb به ازای دمای ۹۰۰ کلوین و در تنش ها و اندازه دانه های مختلف.

تا آنجا که می دانیم، اکثر نتایج تجربی برای رفتار خزشی آلیاژهای زیرکونیومی برای فشارهای پایین انجام شده است و در اینجا نشان داده شده است که برای فشارهای بالا مرحله خزش شتاب یافته یک پدیده غالب خواهد بود. همانطور که در شکل ۳ به طور کلی مشاهده می شود، افزایش فشار باعث افزایش غلظت تهی جای تعادلی می شود و ممکن است باعث روند خزش سریعتر شود. همچنین با افزایش اندازه دانه مشاهده می شود که سرعت خزش سطح به حجم و به طور معادل آن باعث افزایش مرز دانه می شود. از آنجایی که مرز دانه بهترین مکان برای ایجاد نابجایی ها و تهی مناسب برای پخش نقیصه ها می شود. بنابراین احتمال پخش سایر نقیصه ها افزایش یافته و احتمال تغییر شکل ساختار بیشتر می شود و روند خزش سرعت می گیرد.

در بخش نهایی به بررسی کمیت میانگین فاصله مربعی می پردازیم که یکی از مقادیر مفید برای بهبود فرآیند درک رفتار خزش است. همانطور که در معادله ۱ ذکر شد، این عامل نشانه جابجایی اتمی از



گرفته است و شبیه سازی های دینامیک مولکولی ابزاری قدر تمند برای تحلیل این پدیده است. در این مطالعه، اثرات دمای بالا، فشار بالا و اندازه دانه در طول فرآیند تغییر شکل خزشی را مورد بحث قرار دادیم. نشان داده شد که افزایش فشار منجر به افزایش نرخ تغییر شکل خزش شد و در این حالت بسیاری از ساختار های شبیه سازی شده در مرحله خزش سوم بودند و باید ناپایدار باشند. بنابراین ساختار غلاف سوخت در فشار بالا پایدار نیست. در نهایت، میانگین فاصله مربع محاسبه شد و نشان داد که افزایش این کمیت در نتیجه افزایش نرخ تغییر شکل است. علاوه بر این، انتشار اتمی یک فرآیند غالب در طول پدیده خزش است.

مرجعها

- [1] H. G. Rickover, L. D. Geiger and B. Lustman, History of the development of zirconium alloys for use in nuclear reactors, Technical Reports TID-26740, Energy Research and Development Administration (March 1975).
- [2] T. A. Hayes, and M. E. Kassner. "Creep of zirconium and zirconium alloys." Metallurgical and Materials Transactions A 37.8 (2006): 2389-2396.
- [3] S. Pal, M. Meraj and C. Deng. Effect of Zr addition on creep properties of ultra-fine grained nanocrystalline Nistudied by molecular dynamics simulations. Comput. Mater. Sci. (2017),126, 38.
- [4] D. Kaddour, S. Frechinet, A. F. Gourgues, J. C. Brachet, L. Portier and A. Pineau. Experimental determination of creep properties of zirconium alloys together with phase transformation. Scripta materialia, 51(6) (2004), pp.515-519.
- [5] R. B. Adamson, C. E. Coleman, and M. Griffiths, Irradiation creep and growth of zirconium alloys: (2019) A critical review. Journal of Nuclear Materials, 521, pp.167-244.
- [6] D. G. Franklin, and R. B. Adamson. "Implications of Zircaloy creep and growth to light water reactor performance." Journal of Nuclear Materials 159 (1988): 12-21.
- [7] P. Hirel, Atomsk: A tool for manipulating and converting atomic data files.Comput. Phys. Commun.2015,197, 212–219.
- [8] D. Chen, Structural modeling of nanocrystalline materials.Comput. Mater. Ence (1995),3, 327–333.
- [9] S. Plimpton, Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics.J. Comput. Phys. (1995) 117, 1–19.
- [10] D. E. Smirnova, and S. V. Starikov. An interatomic potential for simulation of Zr-Nb system. Computational Materials Science 129 (2017) PP. 259-272.
- [11] W. Humphrey, A. Dalke, and K. Schulten, "VMD-Visual Molecular Dynamics", J. Molec. Graphics, (1996) vol. 14, pp. 33-38.
- [12] M. Meraj, S. Pal, Creep Behavior Study of Join of Nano Crystalline Stainless Steel and Nanocrystalline Nickel Using Molecular Dynamics Simulation.J. Mol. Model. (2016) 2, 136–144.
- [13] M. L. Swanson, et. al., DÉFECTS IN QUENCHED ZIRCONIUM. Atomic Energy of Canada Ltd., Chalk River (Ontario) No. AECL-3428 (1969). Chalk River Nuclear Labs.
- [14] G. Samolyuk, et. al. Self-interstitial configurations in HCP Zr: a first principle analysis, phil. Mag. Lett. 93 (2) (2013) 93-100.
- [15] W. G. Wolfer Fundamental properties of defects in metals. Comprehensive nuclear materials 1 (2012): PP. 1-45.
- [16] M.A. Meyers, A. Mishra, D.J. Benson, Mechanical properties of nanocrystalline materials.Prog. Mater. Sci. (2006) 51, 427–556.
- [17] M.F. Ashby, D.R.H Jones .An Introduction to Properties, Applications, and Design; Butterworth-Heinemann:Oxford, UK, (1995): pp. 274–323.

نقطه اولیه آنها در ساختار است. به عبارت دیگر، مسیر تحول زمانی جابجایی های اتمی به طور کمی توسط MSD نشان داده می شود. جابجایی های اتمی منجر به تولید نقیصه می شود و این نقیصه ها می تواند در حضور یک گرادیان فشار در ساختار پخش شوند و ممکن است منجر به تغییر شکل های خزشی شود. صرف نظر از اینکه فرآیند تکامل نوع نقص چقدر پیچیده است، مقادیر بالای MSD ممکن است به عنوان رخ دادن خزش در ساختار استنباط شود. می توان ادعا کرد که کاهش اندازه دانه ممکن است منجر به افزایش سرعت پخش اتم ها شود. علاوه بر این، این مرعت پخش اتمی با دما و فشار افزایش می یابد. با افزایش و خود بین-نشین های بیشتری تولید می شود به طوری که پخش قالب در مکانیسم خزش ساختار آلیاژی Zr-1% Nb است.



شکل ۴. فاصله میانگین مربعی ساختار آلیاژ Zr-1%Nb به ازای تنش ها و اندازه دانه های مختلف.

نتيجه گيرى

رفتار خزشی موادی که در صنعت هستهای مورد استفاده قرار میگیرند موضوع برجستهای است که سالهاست مورد توجه قرار





## ساختار نواری نانونوار تکلایهی P2C با ساختار لبه های مختلف در ساختار پنتاگرافن با استفاده از

نظریه تابعی چگالی

برزه کار، المیرا <sup>۱</sup>؛ حکمت شعار، محمد حسین <sup>۱</sup>؛ حسین پور، پریناز <sup>۱</sup>؛ رضایی، قاسم<sup>۲</sup>؛ جلیلیان، جعفر<sup>۲</sup>

۲ گروه فیزیک، دانشکده علومپایه، دانشگاه یاسوج ، یاسوج، ایران

## چکیدہ

در این مقاله، با استفاده از محاسبات اصول اولیه مبتنی بر نظریه تابعی چگالی به بررسی پایداری ساختارها و همچنین تغییرات گاف انرژی در نانونوارهای یک بعدی P2C با ساختار لبههای مختلف کربن-کربن، کربن-فسفر و فسفر-فسفر پرداخته یم. محاسبات ما نشان داد که نانوارها با هر سه لبه مختلف، دارای پایداری ترمودینامیکی هستند و نیمرساناهایی با گافهای انرژی مختلف برای ساختار لبههای مختلف می باشند. همچنین ملاحظه شد که وقتی لبه نانونوارها هیدروژنه نمی شود، ساختار نوار انرژی برای اسپین بالا و پایین متفاوت می شود و این موضوع وجود خاصیت مغناطیسی در این نانونوارها را آشکار می کند. اما زمانی که اتمهای لبه ساختارها هیدروژنه می شوند، ساختار نواری برای اسپین بالا و اسپین پایین یکسان می مود.

**واژه های کلیدی**: نانونوار یک بعدی، تئوری تابعی چگالی، ساختار نواری و پتاگرافن.

# Band structure of P<sub>2</sub>C monolayer nanoribbon with different edge structure in pentagraphen structure by using density functional theory

Barzekar, Elmira<sup>1</sup>; Hekmatshoar, Mohammad Hossein<sup>1</sup>; Hosseinpour, Parinaz<sup>1</sup>; Rezaei, Ghasem<sup>2</sup>; Jalilian, Jaafar<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Sahand University of Technology, Tabriz, Iran <sup>2</sup> Department of Physics, University of Yasouj, Yasouj, Iran

#### Abstract

In this article, we have investigated the structures stability and band gap changes of one-dimensional  $P_2C$  nanoribbons with different edge structures of carbon-carbon, carbon-phosphorus, and phosphorus-phosphorus, by using first-principle calculations based on density functional theory. Our calculations showed that nanoribbons with all three different edges have thermodynamically stabilities, and they are semiconductors with different energy gaps for different edge structures. It was also observed that when the edge of the nanoribbons represent the existence of the magnetic property. But when the atoms at the edge of the structures are hydrogenated, the band structure becomes the same for up and down spin.

Keywords: One-dimensional nanoribbon, density functional theory, band structure, pentagraphen.

PACS No. 73 , 81.

داشته باشد. از زمان کشف گرافن [۱]، مواد دوبعدی به دلیل خواص الکترونی و اپتیکی منحصربفردشان و همچنین کاربرد بالقوه در دستگاههای الکترونی توجه زیادی را به خود جلب

پیش بینی و ساخت مواد جدید با ویژگی های الکترونیکی و نوری جدید می تواند نقش مهمی در توسعه ابزارهای الکترونوری جدید

مقدمه

کردهاند. با این حال مانع اصلی برای گرافن، گاف انرژی صفر است که مانع از ادغام صفحات دوبعدی تمام کربنی در فناوری نیمرساناها میشود. تغییر در ساختاربلوری، غالباً خواص مواد را به شدت تغییر میدهد. بنابراین بسیاری از محققان معتقدند که خواص الکترونی گرافن را با تغییر بلوک ساختاری آن از شش ضلعی به پنج ضلعی می توان اصلاح کرد. با استفاده از تئوری تابعی چگالی، ژانگ و همکاران [۲] نشان دادند که پنتاگرافن چنین مادهای است. این ساختار دارای تقارن p-421m است و می تواند دمایی تا ۱۰۰۰k را تحمل کند. علاوه براین پنتاگرافن یک نیمرسانای با گاف انرژی غیرمستقیم ۳/۲۵ eV است و می توان خواص الکترونی آن را با روشهای مختلف تغییر داد. با برش صفحات دوبعدی پنتاگرافن در جهتهای مختلف کریستالوگرافی، نانونوارهای پنتاگرافن یک بعدی با لبه های مختلف زیگزاگ، آرمچیر و دندانهای بدست میآید [۳]. نانونوارهای یک بعدی به دلیل اثرات محصور شدن کوانتومی، گاف انرژی بزرگتری از ساختار دوبعدىشان دارند. همچنين خواص الكتروني أنها تحت تأثیر ماهیت لبههای نانونوارها میباشد. تعداد محدودی از نانونوارهای پنتاگونال تاکنون بررسی شدهاند [٤-١٣]. ما میخواهیم خواص ساختاری و الکترونی نانونوارهای پنتاگونال P2C با سه ساختار لبه مختلف کربن-کربن(C-C)، کربن-فسفر (P-C) و فسفر –فسفر (P-P) را با استفاده از تئوری تابعی چگالی مورد مطالعه قرار دهيم.

## روش انجام محاسبات

در این تحقیق از سوپرسلهایی با اندازههای مختلف از دو تا هشت برابر یاخته پایه نانونوار P2C، که در راستای عرض نانونوار

با سه ساختار لبه مختلف P-C، C-C و P-P گسترش یافته، استفاده میشود. برای پیدا کردن عرض بهینه نانونوارها، چگالی حالتها برای هر سه نانونوار با ساختار لبههای مختلف محاسبه شد. سپس با مقایسه چگالی حالتهای بدست آمده برای اتم مرکزی در ساختار نانونوارها با چگالی حالتهای بدست آمده برای ساختار دوبعدی P2C، نانونوار با عرض هشت برابر یاخته پایه، به عنوان

عرض بهینه در نظر گرفته میشود. در ادامه همه محاسبات برای این عرض با سه ساختار لبه مختلف، که در شکل ۱ از نمای بالایی و جانبی نشان داده شده است، انجام خواهد گرفت.



محاسبات ابتدا به ساکن براساس نظریه تابعی چگالی با بسط پتانسیل تبادلی همبستگی، در تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA-PBE) بکار برده شده است. محاسبات با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو [۱۶] برای حالت غیر اسپینی صورت میگیرد. در این بسته محاسباتی، الکترونهای مغزی که تأثیر محسوسی در خواص الکترونی و پیوندهای شیمیایی ندارند، با محسوسی در خواص الکترونی و پیوندهای شیمیایی ندارند، با شبه پتانسیلهای مناسب جایگزین میشوند. در این محاسبات با استفاده از روش مونخورست-پک نقاط فضای وارون در ناحیه شده است. همچنین با ایجاد خلأ مناسب ۱۲ آنگستروم در دو راستای عمود بر نانونوار و همچنین راستای عرض آن میتوان از برهمکنشهای واندروالس بین نانونوار و دیگر نانونوارهای واقع در همسایگی آن تا حدود زیادی چشمپوشی کرد.

# بحث و نتیجهگیری

برای بررسی پایداری ترمودینامیکی نانونوارها، انرژی بستگی ساختارها محاسبه میشود. فرمول انرژی بستگی به صورت زیر میباشد:





شکل ۳: نمودار ساختار نواری برای سه ساختار لبه مختلف در دو حالت هیدروژنه شده و هیدروژنه نشدهی نانوارهای P<sub>2</sub>C برای عرض بهینه هشت برابر یاخته پایه

نمودارهای قرمز مربوط به ساختار نواری با اسپین پایین و نمودارهای آبی مربوط به ساختار نواری با اسپین بالا هستند. همانطور که در شکل ۳ نشان داده شده است، ساختار نواری و همچنین گاف انرژی برای اسپین بالا و پایین برای هر سه ساختار یکسان نیست، که این موضوع وجود یک ویژگی مغناطیسی در این ساختارها را آشکار میکند. اما زمانیکه لبه نانونوارها با اتمهای هیدروژن، هیدروژنه می شوند، ساختار نواری در اسپین بالا و پایین در لبههای C-C ، C-C و P-P یکسان می شود و هر سه نانوار خاصیت نیمرسانایی از خود نشان می دهند. مقادیر گاف انرژی به دست آمده برای ساختار لبههای مختلف در دو حالت بدون

$$E_{coh} = \frac{(E_{P_2C} - n_P E_P - n_C E_C)}{n_P + n_C}$$

که در آن  $\mathbf{F}_{\mathbf{F}} = \mathbf{F}_{\mathbf{F}} = \mathbf{F}_{\mathbf{F}}$  به ترتیب برابر انرژی کل نانونوار P<sub>2</sub>C و انرژی کل اتمهای منزوی فسفر و کربن است و  $\mathbf{F}_{\mathbf{F}}$  و  $\mathbf{F}_{\mathbf{F}}$  تعداد اتمهای فسفر و کربن در ابریاخته میباشند. ما سه ساختار با لبههای مختلف P-C ، C-C و P-P درنظر می گیریم. تغییرات انرژی بستگی برحسب عرض نانونوارها به صورت شکل ۲ میباشد.



شکل ۲ : نمودار تغییرات انرژی بستگی برحسب عرض نانونوارها برای سه ساختار لبه مختلف

طبق تعریف، انرژی بستگی منفی نشان می دهد که ساختار مربوطه از نظر انرژی مطلوب و نانونوار پایدار است. همانطور که ملاحظه می شود، با افزایش عرض نانونوارها، انرژی بستگی کاهش یافته و سیستم پایدارتر می شود، که این رفتاری است که معمولاً در اکثر نانونوارها مشاهده می شود. همچنین نانونوار با ساختار لبه C-C کمترین انرژی بستگی را دارد، که نشان می دهد پایدارترین نانونوار در مقایسه با دو نانونوار دیگر است. برای بررسی خواص الکترونی نانونوارها، به محاسبه ساختار نواری می پردازیم. ساختار نواری نانونوارها با سه ساختار لبه مختلف برای حالتی که لبه نانونوارها هیدروژنه نشده و همچنین زمانیکه اتمهای لبه نانونوارها هیدروژنه می شود، در شکل ۳ نشان داده شده است.



[6] Mi, T. Y., Khanh, N. D., Ahuja, R., & Tien, N. T. (2021). Diverse structural and electronic properties of pentagonal SiC2 nanoribbons: A first-principles study. *Materials Today Communications*, *26*, 102047.

[7] Tien, N. T., Van On, V., Thi Bich Thao, P., & Le Thanh, N. Insights on Modulating Electronic and Transport Properties of the Sawtooth-Sawtooth Penta-Sic2 Nanoribbons Under Uniaxial Strain by First Principles Calculations.

[8] Mi, T. Y., Triet, D. M., & Tien, N. T. (2020). Adsorption of gas molecules on penta-graphene nanoribbon and its implication for nanoscale gas sensor. *Physics Open*, *2*, 100014.

[9] He, C., Wang, X. F., & Zhang, W. X. (2017). Coupling effects of the electric field and bending on the electronic and magnetic properties of penta-graphene nanoribbons. *Physical Chemistry Chemical Physics*, *19*(28), 18426-18433.

[10] Li, Y. H., Yuan, P. F., Fan, Z. Q., & Zhang, Z. H. (2018). Electronic properties and carrier mobility for penta-graphene nanoribbons with nonmetallic-atom-terminations. *Organic Electronics*, *59*, 306-313.

[11] Yuan, P. F., Zhang, Z. H., Fan, Z. Q., & Qiu, M. (2017). Electronic structure and magnetic properties of penta-graphene nanoribbons. *Physical Chemistry Chemical Physics*, *19*(14), 9528-9536.

[12] Tien, N. T., Thao, P. T. B., & Chuong, D. H. (2022). First-principles study of electronic and optical properties of defective sawtooth pentagraphene nanoribbons. *Computational Materials Science*, 203, 111065.

[13] Wu, T., Yao, M., Li, J., Li, M., & Long, M. (2020). First-principles prediction of the electronic property, carrier mobility and optical absorption in edge-modified pristine sawtooth penta-graphene nanoribbons (SSPGNRs). *Results in Physics*, *17*, 103103.

[14] Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., ... & Wentzcovitch, R. M. (2009). QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of physics: Condensed matter*, *21*(39), 395502.

هیدروژن و با هیدروژن در جدول ۱ نشان داده شده است. این گاف انرژیهای بدست آمده برای ساخت دستگاههای الکترونیکی، به ویژه حسگرهای گاز مناسب هستند.

جدول ۱: گاف انرژی بدست آمده در ساختار لبه های مختلف بدون هیدروژن و باهیدروژن

لبەھای مختلف ساختارھا	C-C	P-C	P-P	C-C- H	Р-С- Н	Р-Р- Н
گاف انرژی اسپین بالا	١/٨٦	1/07	١/٥٦	1/AV	١/٨٥	١/٨٩
گاف انرژی اسپین پایین	1/1V	• /⁄⁄/٣	•/AY	1/AV	١/٨٥	١/٨٩

## نتيجه گيرى

در این کار ما نانونوارهای پنتاگونال P<sub>2</sub>C با ساختار لبههای مختلف را بررسی کرده و عرض بهینه را در عرض هشت برابر یاخته پایه نانونوار P<sub>2</sub>C بدست آوردیم. نانونوار با ساختار لبه C-C کمترین انرژی بستگی را دارد و پایدارترین نانونوار است. نانونوارهای بدست آمده دارای خاصیت نیمرسانایی هستند و این گافهای انرژی بدست آمده برای ساخت دستگاههای الکترونیکی، به ویژه حسگرهای گاز مناسب هستند.

# مرجعها

[1] Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D. E., Zhang, Y., Dubonos, S. V., ... & Firsov, A. A. (2004). Electric field effect in atomically thin carbon films. *science*, *306*(5696), 666-669.

[2] Zhang, S., Zhou, J., Wang, Q., Chen, X., Kawazoe, Y., & Jena, P. (2015). Penta-graphene: A new carbon allotrope. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, *112*(8), 2372-2377.

[3] Yuan, P. F., Zhang, Z. H., Fan, Z. Q., & Qiu, M. (2017). Electronic structure and magnetic properties of penta-graphene nanoribbons. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 19(14), 9528-9536.

[4] Dantas, M. A. L., Frazão, N. F., Azevedo, D. L., & Lima, J. R. (2021). Electronic, magnetic and optical properties of penta-BN2 nanoribbons: A first principles study. *Computational Materials Science*, *190*, 110275.

[5] Correa, J. D., Pacheco, M., Bravo, S., & Chico, L. (2020). Electronic and magnetic properties of pentagonal nanoribbons. *Carbon*, *162*, 209-219.



بررسی خواص ایتیکی بروفن در حضور ناخالصی کروم عباسي ، طيبه ا ا شرکت توزیع نیروی برق تهران بزرگ، تهران، ایران چکیدہ

بروفن ماده دو بعدی تک لایه متشکل از اتمهای بورون در سال ۲۰۱٦ بر روی زیر لایه تحت شرایط خلا بسیار بالا سنتز شد. در این مقاله به بررسی خواص اپتیکی بروفن با گروه فضایی CMMM (که به صورت تئوری پیشرینی شده است)، پرداخته می شود. ابتدا خواص اپتیکی صفحه بروفن خالص را مورد بررسی قرار داده و سپس همین خواص را درحضور ناخالصی کروم مورد مطالعه قرار می دهیم. مشاهده می شود ورود ناخالصی کروم، میزان جذب در محدوده نور مرئی در ساختار دوپ شده را نسبت به ساختار خالص کروم مورد مطالعه قرار می دهیم. مشاهده می شود ورود ناخالصی کروم، میزان جذب در محدوده نور مرئی در ساختار دوپ شده را نسبت به ساختار خالص افزایش می دهد. همین طور میزان بازتاب نور و میزان اتلاف انرژی در ساختار دوپ شده نسبت به ساختار خالص کاهش داشته است. علاوه بر این میزان هدایت الکتریکی در ساختار دوپ شده نسبت به ساختار خالص افزایش پیدا کرده است. در نهایت با توجه به تغییرات اپتیکی به وجود آمده در ساختار بروفن ناشی از دوپ کروم، به نظر می دسد که از تغییرات حاصل به بهترین شکل می توان در راسنای اهدافی خاص از استاده کرد.

واژه های کلیدی: بروفن- خواص اپتیکی- کروم

#### The Optical Properties of Borophene In The Presence of Cr Impurities

Abasi, Tayebeh<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Great TehranElectronicDistribution Company,Tehran,Iran

#### Abstract

Borophene was synthesized a two-dimensional monolayer material of boron atoms in 2016 on a substrate under very high vacuum conditions. In this Paper, the optical properties of Borophene with cmmm space group that are discussed in theory. First, we examine the optical properties of the pure Borophene sheet and then we study the same properties in the presence of Cr impurity The impurity entry increases the absorption in the IR range compared to the pure structure. Also, the reflected light and energy loss in the doped structure decreased as compared to the pure structure. In addition, the electrical conductivity in the doped structure is increased compared to the pure structure. Finally, the optical changes in the structure of Borophene induced by Cr doping, it seems that the resulting changes can best be achieved by increasing the efficiency of solar cells. **Keywords:** Borophene, Optical Properties, Cr

#### *PACS No.* 78

گرمایی میباشند و با اعمال تغییراتی از جمله افزایش یا کاهش تعداد لایهها، اعمال میدان الکتریکی و وارد کردن ناخالصی یا جای خالی میتوان خصوصیات آنها را تغییر داد. در سالهای اخیر، صفحات دو بعدی بورون با عنوان بروفن به صورت تئوری و آزمایشگاهی مورد مطالعه قرار گرفته است. بروفن ماده دو بعدی تک لایه متشکل از اتمهای بورون در سال ۲۰۱۲ بر روی زیر لایه تحت شرایط خلا بسیار بالا سنتز شد. البته تعداد زیادی آلوتروپ

مقدمه

کشف مواد دو بعدی مانند گرافن، TMDs، فسفرین و ... با ضخامتی در حدود چند اتم فرصتی تازه را برای جستجوی روش های کنترل خواص مواد به دنبال داشت که منجر به ساختارهایی جدید با قابلیت بسیار بهتر در حوزههای مختلف شده است. این مواد دارای خصوصیات قابل توجه مکانیکی، الکترونیکی، اپتیکی و ڎٳۺڲٳۘۘ <u>بيه</u>ييني

عبارتن  $b = 6/73A^0$  و  $a = 5/83A^0$  و  $b = 6/73A^0$  و عبارتن  $c = 29/98A^0$  و  $c = 29/98A^0$  . شعاع کرهٔ موفین تین برای بورون ۱/۵۷ برابر آنگستروم به دست آمد. مقدار Rkmax برابر ۸ و Gmax برابر ۸ و Gmax برابر ۵ یا و پارامتر Kpoint نیز برابر ۱۰۰ انتخاب شده است. در شکل ۱ ساختار صفحهٔ دو بعدی بورون با گروه فضایی از اتم بورون که حفره- می شود. ساختار مسطح شامل ردیف هایی از اتم بورون که حفره- مهای هگزاگونال به صورت یک در میان در بین آنها قرار گرفته- مفایه های هگزاگونال به صورت یک در میان در بین آنها قرار گرفته- صفحه (راستای Z) و در صفحه (راستای X) می باشد.



شکل ۱. ساختار صفحهٔ دو بعدی بورون با گروه فضایی cmmm عموماً ورود ناخالصی ها از جمله فلزات واسطه به ساختار مواد دوبعدی باعث ایجاد خواص مغناطیستی جالب و ایجاد پلاریزاسیون اسپینی در ماده می شو. ناخالصی وارد شده در ساختار صفحه بورون با گروه فضایی cmmm، اتم کروم می باشد. این اتم با یکی از اتم های بورون در سلول واحد جایگزین می شود که در شکل ۲ مشاهده می شود.



شکل۲: ساختار صفحهٔ دو بعدی بورون با گروه فضایی cmmm در حضور ناخالصی کروم

دو بعدی بورون هم به صورت تئوری پیشبینی شده است. این صفحهها شبکههای مثلثی با نظمی متفاوت از حفرههای پریودیک هگزاگونال میباشند. نحوه قرارگیری اتمها و شکل متفاوت حفره های هگزاگونال باعث به وجود آمدن صفحات متفاوت از بروفن می شود. بروفن دارای خواص بسیار جالب می باشد از جمله این که بورون در حالت بالک نیمه رسانا است در حالی که بروفن خاصیت فلزی از خود نشان میدهد. این ماده دارای مدول یانگ متفاوت در راستاهای مختلف صفحه میباشد و حتی در یک راستا دارای مدول یانگ ببیشتر از گرافن میباشد. همچنین خواص اپتیکی ناهمسانگرد برای این ماده گزارش شده است و دارای شفافیت و هدایت الکتریکی مناسب جهت کاربرد در فتوولتائیک میباشد. (۱-٥). در این مقاله به بررسی خصوصیات اپتیکی ساختار بروفن با گروه فضایی cmmm (یکی از ساختارهای بروفن که به صورت تئوری پیشبینی شده است) به صورت خالص و در حضور ناخالصی پرداخته میشود. از جمله اتلاف انرژی، بازتاب، جذب و هدایت اپتیکی مورد بررسی قرار گرفته میشود که تاکنون برای این ساختار گزارش نشده است. تابش نیز در دو راستای عمود بر صفحه (راستای Z ) و در صفحه (راستای X ) میباشد. ورود ناخالصی، میزان جذب در محدوده نور مرئی در راستای صفحه و عمود بر صفحه در ساختار دوپ شده را نسبت به ساختار خالص افزایش میدهد. همین طور میزان بازتاب نور و میزان اتلاف انرژی در ساختار دوب شده نسبت به ساختار خالص در هر دور استا کاهش داشته است. علاوه بر این میزان هدایت الکتریکی در ساختار دوب شده نسبت به ساختار خالص افزایش پیدا کرده است. مطالعات نشان داده صفحههای دو بعدی بورون در مقابل اکسیداسیون کاملاً پایدار هستند و همین امر جذابیت این صفحات را برای بررسی بیشتر به منظور کاربردهای عملی در صنعت افزایش داده است. (٦)

## روش و جزئیات محاسبه

محاسبات اصول اولیه بر اساس نظریهٔ تابعی چگالی و مدل wien 2k و با استفاده از بستهٔ شبیهسازی FP-LAPW+ LO انجام گرفت و از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) برای انرژی تبادلی-همبستگی استفاده شده است. ثابتهای شبکه بهینه شده څانشکان سیکی کی بیکینیکی

بررسي خواص اپتيكي

جذب اپتیکی نتیجه گذار بین نوار و درون نواری می باشد که از حالتهای اشغال شده به حالتهای اشغال نشده اتفاق می افتد. در شکل ۳و ٤ نمودار جذب ساختار بروفن را در دو حالت بدون ناخالصی و با ورود ناخالصی مشاهده می کنیم. همان طور که به وضوح مشاهده می شود در هر دو حالت تابش در صفحه و عمود بر صفحه در محدوده نور مرئی، جذب در زمانی که ناخالصی به ساختار وارد می شود افزایش داشته است. در حالت **X**ااع بنابراین با توجه به افزایش میزان جذب با ورود ناخالصی کروم به ساختار بروفن، می توان از این مزیت جهت اهدافی خاص استفاده بهینه کرد. ناهمسانگردی ماده به دلیل تفاوت میزان جذب در انرژیهای پایین مشهود است.



شکل ٤: نمودار جذب در ساختار بروفن دوپ شده نمودار بازتاب در دو حالت ساختار خالص بروفن و ساختار دوپ شده در شکل ٥ و ٦ نشان داده شده است. میزان بازتاب در ساختار دوپ شده در هر دو راستا نسبت به ساختار خالص به میزان قابل توجهی کاهش داشته است. در ساختار دوپ شده در

محدوده نور مرئی بازتاب به زیر ۲۰٪ میرسد، در حالی که در ساختار خالص میزان بازتاب بالای ٤٠٪ میباشد. به ویژه در محدوده نور مرئی، کاهش چشمگیر میزان بازتاب این امکان را فراهم میآورد که استفاده از ساختار دوپ شده بروفن جهت استفاده در سلولهای خورشیدی مورد توجه قرار گیرد.



یکی از پارامترهای مهم در اپتیک، تابع اتلاف انرژی است. چندین راه برای تحریک الکترونها در یک جامد وجود دارد. یک راه که وابسته به طیف اپتیکی است، تحریک الکترونها توسط دیگر الکترونها میباشد که به وسیله تاباندن یک اشعه از الکترون-های تکانرژی به نمونه و تجزیه انرژی منعکس شده انجام می-شود. طیف اتلاف انرژی میتواند ناشی از تحریک الکترونهای شود. طیف اتلاف انرژی میتواند ناشی از تحریک الکترونهای تکانرژی در جامد که با جذب فوتون اتفاق میافتد و یا از تحریک دسته جمعی الکترونهای والانس که پلاسمون نامیده می-شود و یا از هر برانگیختگی دیگری باشد. طیف اتلاف انرژی دو ساختار خالص و دوپ شده بروفن در شکل ۷ و ۸ نشان داده شده است.

در راستای Z عملاً در ناحیه IR (مرئی) و انرژیهای پایین UV اتلاف بسیار اندک است. در راستای X نیز در محدوده نورمرئی

پیکی مشاهده نمی شود و بعد از ناحیه مرئی پیکهایی ظاهر می-شوند که البته میزان اتلاف در این راستا نسبت به راستای Z بیشتر است. بنابراین در ناحیه نور مرئی گذار و تحریک قابل توجهی وجود ندارد. اما میزان اتلاف انرژی در ساختار دوپ شده نسبت به ساختار خالص در راستای X کمتر و در راستای Z برای انرژی-های کمتر از ۸ الکترون ولت به میزان بسیار ناچیزی بیشتر می باشد.



شکل ۸: نمودار تابع اتلاف انرژی در ساختار بروفن دوپ شده هدایت اپتیکی به قسمت موهومی تانسور دی الکتریک وابسته است. الکترونهای حالت اشغال شده در اثر جذب فوتون به حالتهای اشغال نشده در بالای تراز فرمی برانگیخته شده که منجر به گذار بین نواری می شوند. در حالت **Zااات** (شکل ۹ و ۱۰)، مشاهده می شود که هدایت اپتیکی بعد از گافی در حدود ۲/٦ الکترونولت شروع می شود، بعد از این مقدار هدایت اپتیکی رو به افزایش است تا در انرژی ۹/۵۲ الکترونولت به ماکزیمم خود می-وسانی دارد، اما در محدوده نور مرئی روندی افزایشی دارد. با مقایسه نمودار در دو حالت ساختار خالص و دوپ شده مشاهده می شود در ساختار دوپ شده میزان هدایت اپتیکی بیشتر است. به

علاوه در محدوده نور مرئی میزان هدایت اپتیکی در ساختار خالص روند افزایشی و سپس کاهشی را دارد. اما در ساختار دوپ شده روند افزایشی دارد. با توجه به اینکه در ساختار دوپ شده میزان جذب نور افزایش پیدا کرده است، افزایش میزان هدایت ایتیکی هم طبیعی است.



نمودار چگالی حالتهای کلی در بروفن خالص و بروفن دوپ شده در دو جهت اسپین بالا و اسپین پایین در شکلهای ۱۱ و ۱۲ رسم شده است. در نمودار چگالی حالتهای بروفن خالص در تراز فرمی حالتهای انرژی مشاهده می شود که نشان دهنده خاصیت فلزی این ساختار می باشد. همین طور رفتار اسپین بالا و اسپین پایین کاملاً متقارن و فاقد خاصیت مغناطیستی می باشد. با ورود ناخالصی نمودار چگالی حالت در جهت اسپین بالا و پایین دچار تغییراتی می شود و مشاهده می شود که در انرژیهای بالاتر تعداد نوارهای انرژی در ساختار دوپ شده نسبت به ساختار خالص افزایش می یابد. در نتیجه می توان گفت در اثر ورود ناخالصی به ساختار، ماده خاصیت مغناطیستی پیدا می کند. مکانیزم تبادلی بین اوربیتال b در کروم و اوربیتال g در اتم بورون عامل پدیدآورنده خاصیت مغناطیستی می باشد.







[1] A. P. Sergeeva, I. A. Popov, Z. A. Piazza, W. L. Li, C. RomaneScu, L. S. Wang, A. I. Boldyrev; " UnderStanding boron through Size-Selected cluSterS: Structure, chemical bonding, and fluxionality"; Acc. Chem. ReS 47 (2014) 1349-1358.

[2] A.J.Mannix, X.F. Zhou, B. Kiraly, J. D. Wood, D. Alducin, B.D.MyerS, X.Liu, B. L. FiSher, U, Santiago, J. R. GueSt, M. J. Yacaman, A. Ponce, A.R. Oganov, M.C. HerSam, N. GuiSinger; "SyntheSiS of boropheneS: AniSotropic, two-dimenSional boron polymorphs"; Science 350 (2016) 1513.

[3] W. Li, L. Kong, C. Chena, J. Goua, Sh. Sheng, W. Zhang, H.Lid, L. Chen, P. Cheng, K. Wu ; " *Experimental realization of honeycomb borophene*"; Sci. Bull **63** (2018) 282-286.

[4] B.Feng, J.Zhang, Q.Zhong, W.Li, S.Li, H.Li, P.Cheng, S.Meng, L.Chen, K.Wu, ; " *Experimental realization of two-dimenSional boron SheetS*"; Nat. Chem **8** (2016) 563-8.

[5] C.Lee, X.Wei, JW. KySar, J.Hone, ; "*MeaSurement of the ElaStic PropertieS and IntrinSic Strength of Monolayer Graphene*"; Science **321** (2008) 385–388

[6] Zhou.X. and et al.; "Semimetallic Two-Dimensional Boron Allotrope with Massless Dirac Fermions. pe with Massless Dirac Fermions"; Physical Review Letters **112(8)**, (2014) 085502



شکل ۱۱: نمودار چگالی حالتهای کلی صفحه بروفن خالص در دو جهت



شکل۱۲: نمودار چگالی حالتهای کلی صفحه بروفن دوپ شده با اتم کروم در دو جهت اسپین بالا و پایین

نتيجه گيرى

با بررسی نتایج به دست آمده مشاهده شد که میزان جذب در محدوده نور مرئی (بیشترین مقدار تابش انرژی خورشید در محدوده نور مرئی میباشد) در راستای صفحه و عمود بر صفحه در ساختار دوپ شده نسبت به ساختار خالص افزایش داشته است.

همین طور میزان بازتاب نور در ساختار دوپ شده نسبت به ساختار خالص کاهش نشان داده است. به علاوه میزان اتلاف انرژی در ساختار دوپ شده نسبت به ساختار خالص در هر دو راستا کاهش پیدا کرده است و همچنین میزان هدایت الکتریکی در ساختار دوپ شده نسبت به ساختار خالص افزایش پیدا کرده است. نمودار چگالی حالتهای کلی بروفن خالص و بروفن دوپ شده در دو جهت اسپین بالا و پائین، خاصیت فلزی ساختار خالص و عدم وجود خاصیت مغناطیستی در آن را تائید میکند. در مقابل خاصیت مغناطیستی در ساختار دوپ شده مشاهده می شود.





# سنتز و مشخصه یابی و رونشانی اکسید نیکل منگنز (NiMnO<sub>3</sub>) بر روی رشتههای پنبه ای–مسی

الخیکانی ، علی حسن ٔ ؛ قنبری، رضا ٔ ؛ قربانی، شعبانرضا ٔ ؛ عربی، هادی ٔ

<sup>۱</sup> آزمایشگاه انرژی و مواد پیشرفته، گروه فیزیک، دانشکدهی علوم، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد <sup>۲</sup> آزمایشگاه انرژیهای تجدیدپذیر، مغناطیس و نانوتکنولوژی، گروه فیزیک، دانشکدهی علوم، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد

#### چکیدہ

در بین ذخیره سازهای انرژی قابل حمل، ابرخازن های الکتروشیمیایی به دلیل کاربردهای روز افزون آنها بسیار مورد توجه هستند. اکسیدهای فلزی دوتایی به دلیل حالتهای مختلف اکسیداسیون و رفتار الکتروشیمیایی بهتر از اکسید منفرد، توجه زیادی را در شبه خازن ها به خود جلب کرده اند. در این تحقیق پودر نانو NiMnO<sub>3</sub> با استفاده از روش هیدروترمال و فرآیند کلسینه کردن به عنوان ماده فعال شبه خازنی سنتز شد. این ماده فعال به صورت غیر درجا بر روی بستری رشته ای متشکل از تارهای نخ پنبه ای و سیم نازک مسی بهم پیچیده شده، نشانده شد. مشخصه یابی ماده ی فعال ته مورت غیر درجا اشعه ایکس، میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی و آنالیز عنصری مورد بررسی قرار گرفت. نتایج سنتز حاکی از تک فازی ماده ی زوی ور بستر رشته ای یکنواخت آن بر روی بستر رشته ای است.

واژه های کلیدی: ذخیره انرژی ؛ اکسید نیکل منگنز؛ ابرخازن رشته ای

# Synthesis, Characterization, and decoration of Nickel Manganese Oxide on a fiber of cotton yarn and copper wire Al khaykanee, Ali Hassan<sup>1</sup>; Ghanbari, Reza<sup>1</sup>; Ghorbani, Shaban Reza<sup>1,\*</sup>; Arabi, Hadi<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Energy and Advance Material Lab, Department of Physics, Faculty of Science, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad <sup>2</sup> Renewable Energies, Magnetism and Nanotechnology Lab, Department of Physics, Faculty of Science, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad

#### Abstract

Among portable energy storage devices, electrochemical supercapacitors are very important due to their increasing applications. Bimetal oxides have attracted much attention as a pseudocapacitor due to their different oxidation states and well electrochemical behavior than single oxide. In this work, NiMnO<sub>3</sub> nanopowder was synthesized using hydrothermal method and calcination process as a pseudocapacitor active material. The active material was decorated in-situ on a fiber substrate of threads of cotton yarn and thin copper wire. Characterization of the prepared active material and its distribution on the fiber substrate were investigated by X-ray diffraction, field emission scanning electron microscopy and elemental analysis. The results showed the single-phase of NiMnO<sub>3</sub> material and its uniform distribution on the fiber substrate.

Keywords: Energy storage; Nickel manganese oxide; Fiber supercapacitor

PACS No. 68

عنوان یکی از مهمترین اهداف در صنعت انرژی، بدست آوردن و ذخیره نمودن انرژی های پایادار و پاک است. در بین ذخیره سازهای انرژی قابل حمل، ابرخازن های الکتروشیمیایی به دلیال کاربردهای روز افزون آنها بسیار مورد اهمیت هستند. در مقایسه با

امروزه تحقیقات زیـادی بـرای جـایگزینی انـرژی هـای تجدیدپذیر با سوخت های فسیلی صورت می گیرد. ابرخازنها بـه

مقدمه

ابرخازن ها، پیل های سوختی معمولا چگالی انرژی بسیار زیادی ارائه می دهند و در مقابل چگالی توان آنها بسیار کم می باشد. باتری های قابل شارژ امروزی که اکثراً لیتیومی هستند، چگالی انرژی خوبی دارند ولی همچنان از چگالی توان کم و تعداد چرخه پذیری پایین رنج می برند. در این بین ابرخازن ها از چگالی توان بسیار زیادی برخوردارند و مطالعات بسیاری برای افزایش میزان انرژی ذخیره شده در آنها در حال انجام است. در صورت موفقیت در افزایش چگالی انرژی در ابرخازن ها، آنها یک کاندید خوب برای ذخیره سازهای انرژی با مزایای سازگاری محیط زیست، دارای طول عمر بالا، ظرفیت توان بالا و قدرت شارژ و دشارژ زیاد هستند [1].

در حالت کلی ابرخازن ها به دو دسته تقسیم می شوند: دو لایه الکتریکی و شبه خازن ها. ابرخازن های دو لایه الکتریکی به علت مساحت سطح ویژه بالا، هدایت الکتریکی بالاتر و ثبات شیمیایی به عنوان پیش سازهای الکترود، به طور وسیعی گسترش میمیایی به عنوان پیش سازهای الکترود، به طور وسیعی گسترش یافته اند اما همچنان ظرفیت ویژه کمی دارند [۲۰۳]. اما شبه خازن ها یا (خازن های اکسایشی – کاهشی)، به علت توانایی انجام واکنش های فارادیک معمولا ذخیره بار زیاد، ظرفیت ویژه نسبتا واکنش های فارادیک معمولا ذخیره بار زیاد، ظرفیت ویژه نسبتا بالا و انرژی ویژه خیلی خوبی را از خود نشان می دهند [۴]. اکسیدهای فلزی دوتایی به دلیل حالتهای مختلف اکسیداسیون و رفتار الکتروشیمیایی بهتر از اکسید منفردتوجه زیادی را به خود جلب کرده اند. علاوه بر این ، جایگزینی برخی یون های سمی و با هزینه بالا با یون های ارزان ، فراوان و دوستدار محیط زیست (به عنوان مثال NG، OS، IN) از اهمیت اقتصادی و زیست محیطی زیادی برخوردار است.

در این تحقیق اکسید فلزی دوتایی نیکل و منگنز (NiMnO<sub>3</sub>) به دلیل توانایی ذخیره انرژی بالا، که از هر دو اکسید نیکل و اکسید منگنز ناشی می شود، به عنوان ماده فعال الکترود انتخاب شد. علاوه بر این، قرار گرفتن نیکل در ساختار می تواند باعث ایجاد بارهای موضعی و بهبود خواص ترابرد شود [۵،۶].

همچنین، رشته های نخ پنبه ای خالص و سیم نازک مسی (به قطر سیم ۱۰۰ میکرومتر) به هم پیچیده شده به عنوان بستر مواد فعال و جمع کننده ی جریان انتخاب شده است. نخ پنبه

ای به دلیل ساختار متخلخل، انعطاف پذیری و استحکام بالا، کاربرد فراوان در صنایع منسوجات، در دسترس بودن در طبیعت و هزینه کم می تواند به عنوان یک بستر مناسب برای بارگذاری مواد الکتروشیمیای برای افزایش قابلیت ذخیره انرژی در ذخیره سازهای رشته ای باشد. اما با این حال، عایق بودن این بستر برای انتقال بار به خارج از ابرخازن ایجاد مشکل خواهد کرد. برای غلبه بر این مشکل از سیم مسی بسیار نازک به دلیل استحکام مکانیکی برتر، وزن سبک و هدایت الکتریکی عالی استفاده شد. به این ترتیب با تواند به عنوان بستر موادفعال و جمع کننده جریان در ابرخازن رشته ای ایفای نقش کند.

# مراحل ساخت الكترود

– سنتز NiMnO<sub>3</sub>

جهت سنتز NiMnO3 از روش هیدروترمال استفاده می شود. ابتدا ۳ میلی مول از نیترات منگنز Ni(NO3)2.4H<sub>2</sub>O و ۳ میلی مول از بی مول از نیترات نیکل NaHCO3(NO3) و ۳ میلی مول از بی کربنات سدیم NaHCO3 به صورت جداگانه در آب دیونیزه توسط همزن مغناطیسی حل می شود و سپس به هم اضافه و به مدت ۲ ساعت هم زده می شوند. محلول سبز رنگ به دست آمده به یک ظرف تفلونی ۸۰ میلی لیتری منتقل گردید و در داخل محفظه فلزی اتوگلاو قرار گرفت. مخزن به مدت ۸ ساعت در دمای  $\Omega^{\circ}$ ۰۵ در آون حرارت دهی شد. پس از خنک شدن طبیعی تا دمای اتاق، محصول سنتز شده سانتریفوژ (با ۴۰۰۰ دور بر دقیقه و به مدت ۵ دقیقه ) و چندین بار با آب دیونیزه و اتانول شسته شد. سپس در دمای  $\Omega^{\circ}$ ۰۷ یک شب خشک شد. در نهایت برای فرآیند کلسینه کردن به کوره لوله ای منتقل شد و در دمای سیاه رنگ ۴۵۰ مایت در اتمسفر آرگون کلسینه شد تا ماده

آماده سازی بستر رشته ای:
 برای آماده سازی بستر رشته ای، ترکیبی از نخ های پنبه ای و
 سیم مسی نازک، ابتدا نخ پنبه ای داخل آب جوش به مدت ۱

ساعت قرار داده شده است. پس از خنک شدن طبیعی تا دمای اتاق، نخ پنبه ای داخل بشر حاوی اتانول قرار داده شد و تحت آلتراسونیک به مدت نیم ساعت شسته شده تا چربی ها و مواد اضافی احتمالی نشسته روی نخ پنبه حذف شود. در مورد سیم مسی، در ابتداء سیم مسی نازک توسط محلول رقیق شده ی آب دیونیزه و LDH تحت آولتراسونیک به مدت ۱ ساعت شسته شده تا چربی ها و اکسیدهای احتمالی نشسته بر روی سیم مسی حذف شود. در نهایت نخ های پنبه ای و سیم مسی نازک داخل آون به مدت ۶ ساعت در دمای C

نشاندن مواد فعال روی بستر:

پس از سنتز ماده NiMnO<sub>3</sub> و آماده سازی بستر رشته ای (سیم و نخ)، مواد فعال به روش غیر درجا بر روی آن نشانده شد. برای این کار دوغابی متشکل از ۸۰٪ ماده ی فعال، ۱۰٪ کربن فعال و ۱۰٪ PVDF <sup>۱</sup> در حلال NMP <sup>۲</sup> تهیه شد. سپس بستر نخ و سیم به مدت ۱ ساعت در داخل این مخلوط تحت آلتراسونیک قرار گرفت و سپس به مدت ۱۲ ساعت در دمای ۸۰ درجه سانتیگراد خشک شد. پودر ماده NiMnO<sub>3</sub> و الکترود آماده شده برای مشخصه یابی ها استفاده شد.

## نتايج و بحثها

- آنالیز پراش اشعه ایکس(XRD)

برای بررسی ساختار و فازهای نمونه ی نیکل منگنز اکساید با طیف پراش اشعه ایکس مورد مطالعه قرار گرفت. شکل ۱ طیف پراش اشعه ایکس را برای نمونه سنتز شده به روش هیدروترمال نشان می دهد. همان طور که در شکل ۱ نشان داده شده است تمام قله های پراش قابل مشاهده را می توان به راحتی در فاز ایلمنیت رومبوهیدال از NiMnO3 با گروه فضایی R3 و شماره رفرنس (JCPDS. 75 .2089) فهرست بندی کرد.

۲ Polyvinylidene fluoride ۲ N-methyl-2-pyrrolidone



ntensity(a.u)

شکل ۱. نمودار XRD مربوط به نمونه سنتز شده NiMnO<sub>3</sub>.

- تصوير برداري FE-SEM :

با استفاده از تصاویر FE-SEM نحوه قرارگیری ذرات و مواد فعال در سطح بستر رشته ای مورد بررسی قرار گرفت. شکل های ۲ الف ، ب و پ بستر رشته ای (سیم و نخ) که مواد فعال روی آن به روش غیر درجا نشانده شده را با بزرگنمایی مختلف نشان می دهد. در شکل ۲ الف تصویر مربوط به بستر رشته ای (سیم مسی و نخ پنبه ای ) به وضوح مشاهده می شود. تصویر ۲ب با بزرگنمایی یکی از تارها را نشان می دهد که مواد روی آن تقریبا به صورت یکنواخت توزیع شده اند. تصویر ۲پ هم با بزرگنمایی بیشتر به وضوح اندازه کوچک دانه ها و توزیع تقریبا یکنواخت آنها را نشان می دهد که نتیجه ای قابل قبول برای نمونه است.



شکل ۲ : تصاویر FE-SEM مربوط به بستر رشته ای و مواد نشسته شده روی آن.

آنالیز طیف سنجی پراش انرژی پرتوی ایکس (EDAX) :
 شکل ۳ نمودار توزیع پراکندگی انرژی را از بستر رشته ای که
 در روی آن نیکل منگنز اکساید قرار گرفته است نشان می دهد.

همان طور که دیده می شود عناصر Nn ، C ، Ni ، O در روی سطح بستر رشته ای دیده می شوند. اتم کربن ناشی از نخ پنبه ای، و حضور عناصر مس و طلا نیز به ترتیب ناشی از سیم مسی و پوشش دهی طلا برای تصویربرداری می باشد. به دلیل اینکه ناحیه ی تصویربرداری فقط شامل یک تار از نخ پنیه ای می باشد، اتم مسی یافت نشده است.



آنالیز عنصری مپینگ:
 نحوه ی توزیع عناصر مورد نظر بر روی سطح یک تار از
 بستر رشته ای با استفاده از آنالیز عنصری مپینگ بررسی و نتایج آن
 در شکل ۴ نشان داده شده است.



شکل ۴: آنالیز عنصری مپینگ از سطح بستر رشته ای.

تصویر SEM یکی از تارهای نخ مورد بررسی توسط آنالیز عنصری در شکل ۴ الف تشان داده شده است. توزیع عناصر Mn ، Ni ، O ،C در این قسمت نیز به ترتیب در تصاویر ۴ب ، پ، ت، و ث نشان داده شده است. این تصاویر به وضوح نشان

می دهند که عناصر به صورت یکنواخت روی بستر رشته ای قرار گرفته اند. در تصویر ۴ ج توزیع همه ی عناصر با رنگ های مختلف در یک تصویر دیده می شوند.

نتيجه گيرى

در ایسن تحقیق پودر اکسید نیکل منگنز به روش هیدروترمال سنتز شد و به روش غیر درجا روی بستر رشته ای شامل نخ پنبه ای و سیم مسی بسیار نازک به هم پیچیده شده، نشانده شد. نتایج ساختارشناسی و مورفولوژی پودر NiMnO3 و نشانده شده ی آن بر روی بستر رشته ای، تشکیل ساختار رومبوهیدال و تک فاز این ماده و توزیع تقریبا یکنواخت و اندازه کوچک دانه ها را روی بستر به صورت کامل تایید می کند.

مرجعها

- M. Vangari, T. Pryor, and L. Jiang. Int. Journal of Energy Engineering, 139 (2013) 22.
- [2] M. Xianwen, T.A. Hatton, C.R. Gregory, A review of electrospun carbon fibres as electrode materials for energy storage, Curr. Org. Chem. 17 (13) (2013) 1390–1401.
- [3] L. Tong, J. Liu, S.M. Boyer, L.A. Sonnenberg, M.T. Fox, D. Ji, J. Feng, W.E. Bernier, W.E. Jones Jr, Vapor-phase polymerized poly(3,4ethylenedioxythiophene) (PEDOT)/ TiO2 composite fibres as electrode materials for supercapacitors, Electrochim. Acta 224 (2017) 133–141.
- [4] J.K. Gan, Y.S. Lim, A. Pandikumar, N.M. Huang, H.N. Lim, Graphene/ polypyrrolecoated carbon nanofibre core–shell architecture electrode for electrochemical capacitors, RSC Adv. 5 (17) (2015) 12692–12699.
- [5] H. Wu, Z. Lou, H. Yang, G. Shen. A flexible spiral-type supercapacitor based on ZnCo2O4 nanorod electrodes Nanoscale 7 2015 1921.
- [6] W. Zhou, D. Kong, X. Jia, C. Ding, C. Cheng, and G. Wen.NiCo2O4 nanosheet supported hierarchical core–shell arrays for high-performance supercapacitors J. Mater. Chem. A 2 2014 6310–5.





# تأثیر اندازه نقطه کوانتومی استوانهای شکل گالیم آرسنیک بر روی خواص ترمودینامیکی آقاجانیمرسار، مونا ۱؛ حسین پور، پریناز ۱ ادانشکاه فیزیک دانشگاه صنعتی سهند، تبریز، ایران

چکیدہ

در این تحقیق به مطالعه نظری خواص ترمودینامیکی نقطه کوانتومی استوانهای شکل گالیم آرسنیک از قبیل آنتروپی و ظرفیت گرمایی میپردازیم. نتایج نشان میدهند که افزایش پتانسیل محبوس سازی، الکترون را به شدت محدود میکند و باعث افزایش انرژی داخلی میشود. بنابراین آنتروپی نقطه کوانتومی کاهش مییابد. همچنین افزایش دما و افزایش شعاع نقطه کوانتومی منجر به افزایش آنتروپی و ظرفیت گرمایی آن می شود. **واژه های کلیدی:** آنتروپی، ظرفیت گرمایی، نقطه کوانتومی استوانهای شکل

#### The effect of the size of cylindrical GaAs quantum dot on the thermal properties

Aghajani marsar, Mona<sup>1</sup>; Hosseinpour, Parinaz<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Faculty of Physics, Sahand University of Technology, Tabriz, Iran

#### Abstract

In this research, we theoretically study the thermodynamic properties of GaAs cylindrical quantum dots such as entropy and heat capacity. The results show that increasing the confinement potential severely confines the electron and increases the internal energy. Therefore, the entropy of the quantum dot decreases. Also increasing the temperature and the radius of the quantum dot leads to an increase in entropy and heat capacity. **Keywords:** entropy, heat capacity, cylindrical quantum dot

PACS No 81

ترمودینامیکی نقاط کوانتومی بوجود آمده است [۳–۲]. مثلاً، برخی مطالعات، ظرفیت گرمایی و آنتروپی را در نقاط کوانتومی در حضور یک میدان مغناطیسی با استفاده از رویکرد آنسامبل کانونیکی و همچنین در نقاط کوانتومی استوانهای با محدودسازی پادمتقارن بررسی کردهاند [۳۵]. محققان دیگر ظرفیت گرمایی نقاط کوانتومی را با محدودسازی گاوسی در حضور اثر زیمان اسپینی [۳] و نقاط کوانتومی هلیومگونه بررسی کردهاند [٤]. همچنین خواص گرمایی نقاط کوانتومی حلقهای شکل دوگانه تحت میدانهای خارجی بررسی شده است [٥].

در این تحقیق ابتدا طیف انرژی و توابع موج را برای نقطه کوانتومی استوانهای شکل گالیم آرسنیک از طریق معادله شرودینگر مقدمه

در طول چند سال گذشته بررسی های متعددی بر روی خواص ترمودینامیکی نقاط کوانتومی به خاطر قابلیت گسترده آن ها برای کاربردهای فناوری در آینده انجام شده است. نقاط کوانتومی، ساختارهایی با مقیاس نانو هستند که ابتدا در اوایل دهه ۱۹۸۰ تولید شدند [۱]. این نانوساختارها عموماً دارای خواص اپتیکی، الکترونیکی و فوتوفیزیکی منحصر بفردی هستند که آن ها را برای برچسبگذاری بیولوژیکی فلورسنت، تصویربرداری سلول های خورشیدی، کامپوزیت ها و آشکارسازی جذاب کرده است [۲]. اخیراً، علاقه و توجه روبه رشدی در مورد خواص آماری و

بهصورت تحلیلی حساب میکنیم، سپس از ترازهای انرژی برای محاسبه آنتروپی و ظرفیت گرمایی استفاده کرده و نمودارهای آنها را بر حسب کمیتهای مختلف رسم و تحلیل میکنیم.

## مدل و محاسبات

برای ایجاد نقاط کوانتومی، الکترونها، حفرهها و یا هردو را در سه بعد فضایی محدود میکنند که این محدود شدن را با یک پتانسیل نشان میدهیم و به آن پتانسیل محدود کننده میگوییم. در این کار مدل استوانهای را برای نقطه کوانتومی انتخاب کردهایم، به این صورت که ارتفاع آن را خیلی کوچک درنظر میگیریم. بعنوان مثال میتوان دیسکی درنظر گرفت که در دو بعد x و y گسترش یافته است، اما بعد z آن خیلی کوچک است. در اینجا، نقطه کوانتومی استوانهای شکل از جنس گالیم آرسنیک که در آلومینیوم گالیم آرسنیک تعبیه شده، درنظر گرفته شده و پتانسیل محدود

$$V(x, y, z) = \begin{cases} V(x, y, z) = \\ V_0(x^2 + y^2) \\ \frac{2R^2}{\infty} \\ 0 \le z \le a \quad x \le R, y \le R \end{cases}$$
(1)

مشاهده میکنیم که تفاوت در گاف تراز انرژی گالیم آرسنیک، آلومینیوم گالیم آرسنید پتانسیل بزرگی را برای ذرات ایجاد میکند و آن را درون نقطهای به شعاع R و ارتفاع a محبوس میکند.

## ویژه مقادیر و ویژه حالتهای انرژی

با درنظر گرفتن پتانسیل برداری A به شکل  $A = \left(\frac{B}{2}\right)(-y, x, 0)$ ، هامیلتونی در حضور میدان مغناطیسی B به صورت زیر تعریف می شود:

$$H = \frac{(P - eA)^{2}}{2m^{*}} + V(x, y, z)$$
 (Y)

با جایگذاری پتانسیل برداری A و پتانسیل محدود کننده رابطه  $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$  (۱) در هامیلتونی فوق و نیز با استفاده از روابط

و 
$$P \to -i \hbar \nabla$$
 و مختصات استوانه  
ای و انجام برخی محاسبات خواهیم داشت:

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) + \frac{1}{8} \left( \frac{eB}{m^*} \right)^2 m^* r^2 + \frac{-i\hbar}{2} \frac{e\beta}{m^*} \left( y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) + \frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{V_0}{2R^2} r^2$$
(r)

 $\omega_0 = \sqrt{\frac{V_0}{m^* R^2}} \quad \Omega = \left(\frac{\omega_c^2}{4} + \omega_0^2\right)^2 \quad \Omega^2 = \left(\frac{\omega_c^2}{4} + \omega_0^2\right)^2$  in the second seco

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) + \frac{1}{2} m^* r^2 \Omega^2 + \frac{i\hbar eB}{2m^*} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$
(i)

با قرار دادن این هامیلتونی در معادله شرودینگر  $H\psi = E\psi$ ، ویژه مقادیر انرژی بهشکار زیر خواهند بود:

$$E = (2n + |L| + 1)\hbar\Omega - \frac{L\hbar\omega_c}{2} + \frac{\hbar^2 \pi^2 n_z^2}{2m^* a^2} \qquad (\circ)$$

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \varphi_{nl}(r,\theta)g(z)$$
 ممچنین ویژه توابع نیز از  $\chi(r,\theta,\varphi) = \varphi_{nl}(r,\theta)g(z)$ دست میآیند که در آن:

$$\varphi_{nl}(r,\theta) = \left(\frac{b}{2\pi L_0^2 |L|(n+|L|)!}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-iL\theta - \frac{br^2}{4L_0^2}\right) \left(\frac{\sqrt{br}}{L_0}\right)^{|L|} L_n^{|L|} \left(\frac{br^2}{2L_0^2}\right) \quad (\mathbf{n})$$

$$g(z) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left[\frac{n_z \pi}{a} \left(z - \frac{ef}{m^* w_0^2}\right)\right]$$
(Y)

در رابطه (٦)، b ضریب ثابت، n و L اعداد کوانتومی،  $L_n$  تابع لاگر و  $\frac{\hbar c}{eB}^{\frac{1}{2}} = L_0$  میباشند.

برای بهدست آوردن انرژی داخلی و کمیتهای ترمودینامیکی، محاسبه تابع پارش ضروری میباشد که با استفاده از رابطه زیر محاسبه میشود [۷]:

 $Z = \sum_{n,n_Z,L} e^{-\beta E} \tag{(A)}$ 

که در آن  $T=rac{1}{k_B T}$  و  $k_B$  ثابت بولتزمن است و T دما می-

با قرار دادن رابطه (۵) در رابطه (۸) و جایگذاری پارامترهای ه<sup>2</sup> ه<sup>2</sup>

و پس از یک  $w = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* a^2}$  و  $y = \frac{1}{2}\hbar\omega_c$   $x = \hbar\Omega$ سری محاسبات، تابع پارش به صورت زیر بدست می آید:

$$U = -(w + \chi) + \frac{w}{2} \coth \frac{w \beta}{2} + \frac{x + y}{2} \coth \frac{x + y}{2} \beta$$
$$+ \frac{x - y}{2} \coth \frac{x - y}{2} \beta$$

با داشتن انرژی داخلی سیستم میتوان ظرفیت گرمای ویژه را نیز با رابطه زیر بهدست آورد:

$$C_{V} = -k_{B}\beta^{2} \left(\frac{\partial U}{\partial \beta}\right) \tag{11}$$

همچنین انتروپی از رابطه 
$$S = \frac{O - F_H}{T}$$
 بهدست می اید که در  
آن F انرژی آزاد هلمهولتز از  $F_H = -\frac{Ln(Z)}{\beta}$  بهدست می آید  
[۷]. بنابراین آنتروپی سیستم برابر خواهد بود با:

$$S = k_B \beta \left[ \frac{w}{2} \coth \frac{w \beta}{2} + \frac{x + y}{2} \coth \frac{x + y}{2} \beta + \frac{x - y}{2} \coth \frac{x - y}{2} \beta \right] - \frac{w \beta}{2} + \frac{w \beta}{2} \left[ -\frac{w \beta}{2} + \frac{w \beta}{2} +$$

$$k_{B}\left[Ln8 + Ln\left(\sinh\frac{w\,\beta}{2}\right) + Ln\left(\sinh\frac{x+y}{2}\,\beta\right) + Ln\left(\sinh\frac{x-y}{2}\,\beta\right)\right] \quad (17)$$

#### بحث و بررسی

در شکل ۱ ظرفیت گرمایی نقطه کوانتومی استوانهای برحسب دما و بهازای شعاعهای مختلف رسم شده است. در اینجا میدان مغناطیسی برابر ۱ تسلا و عمق پتانسیل برابر ٤ میلی الکترون ولت درنظر گرفته شده است.



شکل ۱ : نمودار ظرفیت گرمایی برحسب دما برای نقطه کوانتومی استوانهای شکل بهازای دو شعاع متفاوت R = 20nm، R = 10nm و به ازای پارامترهای B = 1T و  $V_0=4meV$ .

مشاهده می شود که با افزایش دما، ظرفیت گرمایی نیز افزایش می-یابد که این افزایش از دمای 50K تا 100K با شیب تندی است. اما از X 100 تا 250K افزایش در ظرفیت گرمایی با شیب ملایم صورت می گیرد. به طوری که افزایش ظرفیت گرمایی از دمای مورت می 100K تقریباً برابر با 8k 0.27 است. همچنین مشاهده می-شود که با افزایش شعاع کوانتومی ظرفیت گرمایی افزایش می یابد. زیرا وقتی شعاع کوانتومی افزایش پیدا می کند، ترازهای انرژی بهم نزدیک شده و در نتیجه مقدار انرژی لازم برای افزایش دما بالا می رود، یعنی ظرفیت گرمایی افزایش می یابد.

شکل ۲ تغییرات ظرفیت گرمایی را برحسب دما، این بار بهازای مقادیر مختلف عمق پتانسیل محبوس سازی و شعاع کوانتومی ثابت ۱۰ نانومتری نشان میدهد. هنگامی که میزان پتانسیل محبوس سازی افزایش مییاید، الکترون به شدت محدود می شود و احتمال کمی برای برانگیختگی به حالت های بالاتر وجود دارد. لذا توانایی جذب انرژی گرمایی برای افزایش دمای نقطه کوانتومی (ظرفیت گرمایی) کاهش مییابد[۸].



شکل ۲ : نمودار ظرفیت کرمایی برحسب دما برای نقطه کوانتومی استوانهای شکل بهازای پارامترهای R = 10 ه B = 17 ، R = 10 و عمق پتانسیل محبوس سازی متفاوت  $V_0 = 4 \ {
m meV}$  و $V_0 = 8 \ {
m meV}$ 

در شکل ۳ آنتروپی نقطه کوانتومی استوانهای برحسب دما و با مقادیر مختلف شعاع کوانتومی رسم شده است. با توجه به نمودار مشاهده میشود که با افزایش دما، آنتروپی نیز افزایش مییابد. زیرا با افزایش دما، انرژی جنبشی الکترون افزایش یافته و باعث افزایش آنتروپی یا بینظمی نقطه کوانتومی میشود [۸]. همچنین با افزایش



اعداد کوانتومی مختلف، نتایج و محاسبات عددی نشان میدهد که با افزایش عمق پتانسیل، بهدلیل وجود پتانسیل محبوس کننده در نقطه کوانتومی، تراز انرژی افزایش مییابد. اما همین پتانسیل محبوس کننده باعث میشود که با افزایش شعاع کوانتومی، تراز انرژی کاهش پیدا کند. همچنین با افزایش شعاع نقطه کوانتومی ظرفیت گرمایی و آنتروپی افزایش مییابند.

## مرجعها

- Alivisatos, A. Paul. "Semiconductor clusters, nanocrystals, and quantum dots", science 271, no. 5251 (1996): 933-937.
- [Y] Pandey, Sulaxna, and Dhananjay Bodas. "High-quality quantum dots for multiplexed bioimaging: A critical review", Advances in colloid and interface science 278 (2020): 102137.
- [r] Boyacioglu, B., and A. Chatterjee. "Heat capacity and entropy of a GaAs quantum dot with Gaussian confinement", Journal of applied physics 112, no. 8 (2012): 083514.
- [٤] De Groote, Jean-Jacques S., J. E. M. Hornos, and A. V. Chaplik. "Thermodynamic properties of quantum dots in a magnetic field", Physical Review B 46, no. 19 (1992): 12773.
- [o] Gumber, Sukirti, Manoj Kumar, Monica Gambhir, Man Mohan, and Pradip Kumar Jha. "Thermal and magnetic properties of cylindrical quantum dot with asymmetric confinement", Canadian Journal of Physics 93, no. 11 (2015): 1264-1268.
- [7] Khordad, R., and HR Rastegar Sedehi. "Thermodynamic properties of a double ring-shaped quantum dot at low and high temperatures", Journal of Low Temperature Physics 190, no. 3 (2018): 200-212.
- [V] Rogel-Salazar, J. "Statistical Mechanics, 3rd edn.", by RK Pathria and PD Beale: Scope: textbook. Level: postgraduate or advanced undergraduate. (2011): 619-620.
- [A] Hosseinpour, P. "The role of Rashba spin-orbit interaction and external fields in the thermal properties of a doped quantum dot with Gaussian impurity", Physica B: Condensed Matter 593 (2020): 412259.

شعاع نقطه چون میزان محبوسسازی الکترون کاهش مییابد، آنتروپی نقطه کوانتومی افزایش مییابد. شکل ٤ نیز نمودار آنتروپی برحسب دما را برای نقطه کوانتومی استوانهای شکل بهازای عمق پتانسیل محبوسسازی مختلف نشان میدهد. مشاهده میشود که با افزایش عمق پتانسیل بدلیل محدود شدن شدید الکترون، آنتروپی کاهش مییابد.



شکل ۳ : نمودار آنتروپی برحسب دما برای نقطه کوانتومی استوانهای شکل به-ازای پارامترهای R = 10nm ، R = 10nm و  $V_0 = 4 \mathrm{meV}$ .



شکل ٤ : نمودار آنتروپی برحسب دما برای نقطه کوانتومی استوانهای شکل به-ازای پارامترهای R = 10nm R = 10 و عمق پتانسیل محبوس سازی متفاوت  $V_0 = 8 \, {
m meV}$  و $V_0 = 4 \, {
m meV}$ 

نتيجه گيري

در این مقاله خواص ترمودینامیکی نقطه کوانتومی استوانهای شکل گالیم آرسنیک بررسی شد. در بررسی ویژه مقادیر انرژی بهازای





# سنتز و مشخصه یابی کامپوزیت منگنز مولیبدنیوم اکساید (MnMoO4) تهیه شده بر روی فوم نیکل

السلطانی ، سعد محمد<sup>۱</sup> ؛ قنبری، رضا<sup>۱</sup> ؛ قربانی، شعبان رضا<sup>۱,\*</sup> ؛ عربی، هادی<sup>۲</sup> آزمایشگاه انرژی و مواد پیشرفته، گروه فیزیک، دانشکاهی علوم، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد <sup>۲</sup>آزمایشگاه انرژی های تجدیدپذیر، مغناطیس و نانوتکنولوژی، گروه فیزیک، دانشکاهی علوم، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد

## چکیدہ

امروزه ابرخازن ها به عنوان یکی از مهم ترین ذخیره سازهای انرژی بسیار مورد توجه قرار گرفته اند. اکسید مولیبدنیوم به دلیل داشتن ساختار لایه ای و فعالیت الکتروشیمیایی خوب به عنوان یک ماده ی شبه خازنی مورد بررسی قرار گرفته است. به منظور افزایش عملکرد الکتروشیمیایی می توان از ترکیبات فلزی دوتایی استفاده کرد و از حالتهای مختلف اکسیداسیون آنها بهره برد. در این تحقیق پودر منگنز مولیبدات (MnMoO4) با استفاده از روش هیدروترمال و فرآیند کلسینه کردن به عنوان ماده فعال شبه خازنی سنتز شد. این ماده فعال به صورت درجا بر روی بستر فوم نیکل نشانده شد. تشکیل ساختار منگنز مولیبدات توسط آنالیز پراش پرتوی ایکس، سطح فوم و قرارگیری صحیح ذرات و عناصر روی آن توسط تصویربرداری SEM و آنالیز EDAX و توزیع یکنواخت این عناصر روی فوم توسط آنالیز عنصری مپینگ نشان داده شد.

واژه های کلیدی: منگنز مولیبدات ، هیدروترمال ، فوم نیکل، ابرخازن

## Synthesis and Characterization of Manganese Molybdenum Oxide Composite (MnMoO<sub>4</sub>) deposited on Nickel Foam

#### Alsoltani, Saad Mohammad<sup>1</sup>; Ghanbari, Reza<sup>1</sup>; Ghorbani, Shaban Reza<sup>1,\*</sup>; Arabi, Hadi<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Energy and Advance Material Lab, Department of Physics, Faculty of Science, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad

<sup>2</sup> Renewable Energies, Magnetism and Nanotechnology Lab, Department of Physics, Faculty of Science, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad

#### Abstract

Noadays, supercapacitors are considered as one of the most important energy storage devices. Molybdenum oxide has been studied as a pseudocapacitive material due to its layered structure and good electrochemical activity. In order to increase the electrochemical performance, bimetal compounds can be used and their different oxidation states can be used. In this research, manganese molybdate ( $MnMoO_4$ ) powder was synthesized using hydrothermal method and calcination process as a pseudocapacitive active material. This active material was deposited in situ on a nickel foam substrate. The formation of manganese molybdate was demonstrated structurally and morphologically by X-ray diffraction, SEM images, EDAX analysis, and mapping elemental analysis.

Keywords: Manganese molybdate; Hydrothermal; Nickel foam; Supercapacitor;

PACS No. 68



ابرخازنها به عنوان يکی از مهمترين ابزارهای جايگزينی انرژی های تجدیدپذیر با سوخت های فسیلی و ذخیره نمودن انرژی های پایدار و پاک است. ابرخازن ها می توانند از مواد متخلخل با سطح ويژه بالا مانند مواد كربني تشكيل شوند و همين سطح ویژه بالاتر باعث ذخیره بارهای بیشتری در روی الکترود ها می شود. علاوه بر این سازوکار، استفاده از واکنش های شیمیایی در ذخیره سازی بار نیز مورد استفاده قرار می گیرد. به طور کلی بنا بر سازوگار ذخیره سازی انرژی، ابرخازن ها می توانند به سه دسته تقسيم بندى شوند: خازن هاى دو لايه الكترواستاتيك، شبه خازن ها و ابرخازن نامتقارن [۱]. مواد کربنی به طور گسترده برای الکترودهای دو لایه الکترواستاتیک مورد استفاده قـرار مـی گیرنـد [۲] و اکسیدهای فلزی انتقالی و پلیمر رسانای الکتریکی معمولاً به عنوان مواد الكترود شبه خازني انتخاب مي شوند [٣]. اكسيدهاي فلزى انتقالي معمولا تحت پتانسيل هاي خاص تحت حالت اکسیداسیون متعدد قرار می گیرند و منجر به افـزایش ظرفیـت مـی شوند [٤ و ٥].

در این تحقیق، اکسید مولیبدنیوم (MoO3) ،کـه دارای یک ساختار لایه ای ۲ بعدی است، به عنوان پایه ی اصلی ماده فعال الكترود ابرخازن انتخاب شد. اين ماده با اين ساختار امكان انتقال يونهاي الكتروليت به بين لايه ها را در طي فرايند ذخيره بار فراهم می کند [7]. به منظور افزایش ظرفیت واکنش های اکسایشی/کاهشی، این ماده با اتم های منگنز نیز آلاینده خواهد شد (MnMoO4). منگنز اعداد اکسایشی مختلفی دارد و تمایل زیاد در انجام واکنش ها رداکسی از خود نشان می دهد که باعث بهبود عملكرد الكتروشيميايي آن مي شود. اين ماده فعال به صورت درجا روی فوم نیکل نشانده شد که می تواند به عنوان یک الکترود ابرخازن استفاده شود. فوم نیکل یک ساختار متخلخل با چگالی بسیار کم می باشد. علاوه بر آن این بستر به عنوان یک جمع کننده ی جریان انعطاف پذیر نیز عمل می کند. نشاندن مواد فعال به صورت درجا نیز باعث می شود نانوذرات بر روی فوم رشد پیدا کرده و علاوه بر چسبندگی خوب، از ایجاد مقاومت های الکتریکی اضافی در فصل مشترک نیز جلوگیری شود.

مراحل ساخت الكترود

سنتز منگنز مولیدنیوم اکساید ونشستن آن روی فوم
 نیکل :

از روش هیدروترمال برای سنتز منگنز مولیبدنیوم ااستفاده شد. چون روش هیدروترمال یک روش ساده و کم هزینه می باشد که در آن نانوذرات با اندازه های کوچک و نسبتا یکنواخت سنتز می شوند. برای سنتز ماده MnMoO4 ، ابتدا ۲/۵ میلی مول از سدیم مولیبدات هیدراته Na2MoO4. 2H<sub>2</sub>O میلی مول از نیترات منگنز هیدراته Na2MOO4. 2H<sub>2</sub>O میلی مول از نیترات منگنز هیدراته Mn(NO3) به طور جداگانه در مقداری آب دیونیزه توسط همزن مغناطیسی حل شد و بعد از محلوط کردن آنها با هم به مدت ۱ ساعت دیگر نیز هم زده شدند. محلول شیری رنگ حاصل به یک تفلون M۰۰ منتقل شده و در ساعت در دمای ۲۰۰۵ در آون حرارت دهی شد. پس از سرد شدن محلول سانتریفیوژ شده و چندبار با آب مقطر و اتانول شسته شد. سپس برای فرایند کلسینه کردن به کوره منتقل گردید و به مدت ۱ ساعت در دمای ۲۰۰۵

همچنین برای نشاندن نمونه روی فوم نیکل، ابتدا فوم نیکل توسط محلول رقیق شده ی HCL تحت آلتراسونیک شسته شده تا چربی ها و اکسیدهای احتمالی نشسته بر روی فوم حذف شود. بعد از خشک کردن کامل آن، فوم نیکل به همراه مخلوط سدیم مولیبدات و نیترات منگنز در ظرف تفلون قرار داده شد. مراحل این سنتز در شکل ۱ نشان داده شده است. برای مشخصه یابی نمونه ها تصاویر SEM، آنالیز XDAZ و آنالیز عنصری مپینگ برای آنها انجام شد که در بخش بعدی مورد بحث قرار می گیرد.





شکل ۱: مراحل سنتز MnMoO₄

نتايج و بحثها

مشخصه یابی نمونه ها توسط آنالیز پراش پرتوی ایکس برای بررسی تشکیل صحیح ساختار منگنز مولیبدات، تصویربرداری SEM برای بررسی سطوح فوم و چگونگی قرارگیری ذرات روی آن ، آنالیز EDAX برای مشاهده عناصر روی سطح و آنالیز عنصری مپینگ برای نحوه توزیع این عناصر روی فوم انجام شد که در ادامه مورد بحث قرار می گیرد.

- آنالیز پراش اشعه ایکس (XRD)

همان طور که در شکل ۲ دیده می شود، نمونه ی ۱ به خوبی تشکیل ماده ی MnMoO4 با ساختار بلوری مونوکلینیک و با شماره کارت MnMoO4 را نشان می دهد. اما همان طور که شماره کارت 2028-07-01 را نشان می دهد. اما همان طور که در شکل نشان داده شده است در زاویه 24.6<sup>°</sup> یک فاز ناخالصی مشاهده می شود (که با خط چین عمودی مشخص شده است) و بنابراین این نمونه نیاز به اصلاح ساختار داشت. برای این منظور مدت زمان کلسینه کردن به ٤ ساعت افزایش داده شد (یعنی در دمای  $\mathbf{C}$  ... ۲۰۰۵ به مدت ٤ ساعت افزایش داده شد (یعنی گذاری شد. همان طور که در شکل ۲ برای نمونه ۲ مشاهده می شود شدت فاز ناخالصی تحت ٤ ساعت کلسینه کردن کاهش یافته شود شدت فاز ناخالصی تحت ٤ ساعت کلسینه کردن کاهش یافته شود شدت ام به طور کامل از بین نرفته است. در برای حذف فاز نمونه قبل از کلسینه شدن، به مدت ۲ ساعت در  $\mathbf{C}$  ... کاملا خشک شود و سپس به مدت ۱ ساعت در دمای  $\mathbf{C}$  ...

پراش اشعه ایکس برای این نمونه در شکل ۲ به عنوان نمونه ی ۳ نمایش داده شده است. مشاهده می شود که قله ناخالصی کاملا حذف شده و نمونه MnMoO4 به صورت تک فاز با ساختار مونوکولینیک به طور صحیح تشکیل شده است.



- آنالیز تصویربرداری میکروسکوپ الکترونی روبشی SEM

با استفاده از تصاویر SEM نحوه قرارگیری ذرات و مواد فعال در سطح فوم نیکل مورد بررسی قرار گرفت. شکل های ۳ الف ، ب و پ فوم نیکلی که مواد فعال روی آن به روش درجا نشانده شده را با بزرگنمایی مختلف نشان می دهد. همان طور که در شکل ۳ پ به وضوح مشاهده می شود ذرات منگنز مولیبدنیوم اکساید به طور یکنواخت بر روی بازوهای فوم نیکل را نشان می تصویر ۳ب با بزرگنمایی یکی از بازوهای فوم نیکل را نشان می دهد که مواد روی آن تقریبا به صورت یکنواخت توزیع شده اند. تصویر ۳پ هم با بزرگنمایی بیشتر به وضوح اندازه کوچک دانه ها و توزیع تقریبا یکنواخت آنها را نشان می دهد که نتیجه ای قابل قبول برای نمونه است.





شکل ۳ : تصاویر SEM مربوط به فوم نیکل و مواد نشسته شده روی آن.

- آنالیز طیف سنجی پراش انرژی پرتوی ایکس (EDAX)

شکل ٤ نمودار توزیع پراکندگی انرژی را از روی یکی از بازوهای فوم نیکلی که در روی آن منگنز مولیبدات MnMoO4 قرار گرفته است نشان می دهد. همان طور که مشاهده می شود، عناصر Mn ، Mo ، مراه با Ni در روی فوم نیکل مشخص است. به این ترتیب با این آنالیز مشخص شد که در حین سنتز به روش هیدروترمال، همزمان ماده منگنز مولیبدن اکساید برروی فوم نیکل هم نشسته است.



علاوه بر حضور این عناصر بر روی فوم، توزیع این عناصر برروی فوم هم از اهمیت زیادی برخوردار است. برای بررسی این موضوع، از آنالیز عنصری مپینگ استفاده شد که نتایج آن در شکل ٥ نشان داده شده است. تصویر SEM بخشی از فوم نیکل مورد بررسی توسط آنالیز عنصری در شکل ٥ الف تشان داده شده است. توزیع عناصر Mo، O ، ال به ترتیب در تصاویر ٥ ب ، پ، ت، و ث نشان داده شده است. این تصاویر به وضوح نشان می دهند که عناصرتشکیل دهنده کامپوزیت به صورت یکنواخت برروی فوم نیکل قرار گرفته اند. در تصویر ٥ ج توزیع همه ی این عناصر با رنگ های مختلف در یک تصویر دیده می شوند.



شکل ٥: آنالیز عنصری مپینگ از سطح فوم نیکل.

نتيجه گيرى

پودر نانو کامپوزیت منگنز مولیبدنیوم اکساید به روش هیدرو ترمال سنتز شد و به روش درجا روی فوم نیکل نشانده شد. برای دست یابی به نمونه ی تک فاز با ساختاری مناسب از فرآیندهای حرارت دهی در دماها و زمانهای مختلف استفاده شد و در نهایت ساختار تک فازی از MnMoO4 بدست آمد. مورفولوژی سطح فوم و نحوه قرارگیری ذرات و مواد فعال برروی آن، و توزیع این عناصر برروی آن توسط آنالیزهای مختلف برسی و تشکیل صحیح این ماده را روی فوم نیکل به عنوان الکترود یک

#### مرجعها

[1] Y. Zhu, S. Murali, M.D. Stoller, K.J. Ganesh, W. Cai, P.J. Ferreira, A. Pirkle, R.M. Wallace, K.A. Cychosz, M. Thommes, D. Su, E.A. Stach, R.S. Ruoff, Carbon-based

supercapacitors produced by activation of graphene, Science, 332 (2011) 1537-1541.

[2] B.E. Conway, Transition from Supercapacitor to Battery Behavior in Electrochemical Energy Storage, Journal of The Electrochemical Society, 138 (1991) 1539-1548.

[3] A. Malak, K. Fic, G. Lota, C. Vix-Guterl, E. Frackowiak, Hybrid materials for supercapacitor application, Journal of Solid State Electrochemistry, 14 (2010) 811-816.

[4] D. Qu, Studies of the activated carbons used in doublelayer supercapacitors, Journal of Power Sources, 109 (2002) 403-411.

[5] P. Simon, Y. Gogotsi, Materials for electrochemical capacitors, Nature Materials, 7 (2008) 845–854.

[6] Y. Wang, J. Guo, T. Wang, J. Shao, D. Wang, Y.-W. Yang, Mesoporous Transition Metal Oxides for Supercapacitors, Nanomaterials, 4 (2015) 1667-1689.





## ترابرد الکترونی در سلول خورشیدی نانو ساختار نقطه کوانتومی LaVO<sub>3</sub>

امینی، محمد ؛ صاحب سرا، پیمان

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

### چکیدہ

در این پژوهش با استفاده از رویکرد تابع گرین غیرتعادلی ترابرد الکترون از میان نقطه کوانتومی لانتانیوم وانادیوم اکساید، به عنوان قطعه مرکزی بین دو هادی فلزی در سمت چپ و راست این را محاسبه کردیم. سامانه همبسته قوی LaVO3 جزء مواد عایق مات محسوب می شود. از این روی برای توصیف این سامانه، ما از مدل هابارد به عنوان یک ملل مؤثر مناسب برای محاسبه تابع گرین غیر تعادلی استفاده می نماییم. این تابع گرین غیرتعادلی از روش معادله حرکت بدست می آید، که با استفاده از آن چگالی حالتهای الکترونی ، عدد اشغال الکترون در نقطه کوانتومی و در نهایت ترابرد الکترونی محاسبه می شود.

واژه های کلیدی: ترابرد الکترونی، نقطه کوانتومی، لانتانیوم وانادیوم اکساید، عایق مات، تابع گرین غیرتعادلی، معادله حرکت.

#### Electron transport in nanostructure LaVO<sub>3</sub> quantum dot solar cell

#### Amini, Mohammad; Sahebsara, Peyman

Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan,

#### Abstract

In this research, using the non-equilibrium green's function approach, we calculated the electron transport through the lanthanum vanadium oxide quantum dot, as the central part between the two metal conductors on the left and right side of it. Strongly correlated electron  $LaVO_3$  is a Mott insulating material. Therefore, to describe this system, we use the Hubbard model as a suitable effective model to calculate the non-equilibrium green's function. This green's function is calculated by using the equation of motion theory; the electron density of states, the occupation number for the quantum dot, and finally electron transport are investigated by the green's function.

*Keywords:* electron transport, quantum dot, lanthanum vanadium oxide, Mott insulators, non-equilibrium green's function, equation of motion

PACS No. 72, 81

است و شکاف نوار انرژی این ماده حدود ۱٫۱ الکترون ولت می باشد [۱]. مطابق منحنی محدودیت شاکلی – کویسر شکاف نواری در مقدار بهینه برای تبدیل انرژی خورشید است، بنابراین این ماده می تواند یک گزینه امیدوار کننده به عنوان جاذب نور در سلولهای خورشیدی باشد. در شکل ۱ منحنی محدودیت شاکلی – کویسر برای چند ماده مختلف آورده شده است. همان طور که مشاهده می شود ماده لانتانیوم وانادیوم اکساید دارای بالاترین بازده است [۲ و ۳]. مقدمه

دلیل نیاز ما به سلولهای خورشیدی بر هیچ کسی پوشیده نیست بنابراین سلولهای خورشیدی باید به گونهای طراحی شوند که بتوانند طول موجهای نور خورشید را که به سطح زمین میرسد با بازده بالا به انرژی مفید تبدیل کنند در بین مواد مختلف شناخته شده، لانتانیوم وانادیوم اکساید ( LaVO ) جزء مواد پروسکایت عایق مات







شکل ۱ : نمودار محدودیت شاکلی کویسر [۳].

عایق های مات موادی هستند که باید بر اساس نظریه نواری رفتار رسانندگی از خود نشان دهند، اما در واقع، آنها به عنوان یک عایق عمل میکنند. با اکسایش آن ها یا با افزودن برخی ناخالصی ها، الکترون آزاد می شود و گذار الکترون (گذار مات) اتفاق می افتد و آنها مانند یک رسانا رفتار میکنند. به عبارتی بهتر موادی که در آنها گذار مات اتفاق می افتد مواد همبسته قوی هستند؛ مدل هابارد یک مدل مناسب در نمایش کوانش دوم برای مواد عایق مات است [۴].

مدل هابارد به هنگام برهمکنش قوی بین الکترونها که همبستگی بین الکترونها ایجاد می شود کاربرد دارد؛ در این مدل برای هر اتم جایگاههایی فرض شده است که الکترونها در این جایگاهها قرار می گیرد و آنها را الکترونهای درونجایگاهی می نامند.

برای توصیف هامیلتونی مدل هابارد در کوانتش دوم مجموعهای از عملگرهای خلق  $\hat{c}^{\dagger}_{j\sigma}$  و عملگر فنا  $\hat{c}_{j\sigma}$ استفاده می گردد. هامیلتونی مدل هابارد را براساس این عملگرها می توان به شکل زیر نوشت:

$$H = \sum_{i,i,\sigma} t_{ij} (\hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{i\sigma}) + U \sum_{i} \hat{n}_{i\downarrow} \hat{n}_{i\uparrow}$$
(1)

 $\sigma$  شاخص i و j معرف مكان فضایی شبكه (جایگاه) و شاخص  $\sigma$  معرف اسپین الكترون است؛ اولین عبارت انرژی جنبشی را بیان می كند و عبارت دوم انرژی ناشی از دافعه كولنی درون جایگاهی  $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}^{\dagger}_{i\sigma}\hat{c}_{i\sigma}$  عدد اشغال الكترون است كه به صورت  $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}^{\dagger}_{i\sigma}\hat{c}_{i\sigma}$  تعریف می شود [۵].

## ساختار لانتانيوم واناديوم اكسايد

یاخته واحد این ماده در دمای اتاق ساختار ارتورومبیک با پارامترهای شبکه ((a=۵٫۵ Å, b=۵٫۵ Å, c=۷٫۸۴ Å) است که با کج کردن



شكل ٢ : ياخته واحد لانتانيوم واناديوم اكسايد [۶].

ساختار حول محور b و چرخاندن حول محور c ساختار آن به پروسکایت تبدیل می شود.

پیکربندی الکترونی این ماده  $(d_{r_g}^r)^r d^r (t_{r_g}^r)$  در کاتیون سه ظرفیتی وانادیوم است؛ در این اکسیدها به دلیل اوربیتال ۳*d* نسبتاً موضعی و برهمکنش قوی الکترون – الکترون به عنوان یکی از مهمترین مواد همبسته قوی مورد مطالعه قرار می گیرند [۱و ۴و ۶].

دافعـه کـولنی در یـک جایگاه کـه بـا دو الکتـرون بـا اسـپین مخـالف اشـغال شـود بـا U = ۳ - ۵ eV تخمـین زده شدهاست [۶]، اما محتمـلتـر اسـت کـه U = ۳٫۶eV باشـد [۳]. بنـابراین در اینجا از این مقدار استفاده شده است.

#### هاميلتوني سامانه

سامانه شامل یک نقطه کوانتومی بین دو هادی فلزی با پتانسیل های شیمیایی متفاوت  $\mu_{1}$  و  $\mu_{1}$  است. هامیلتونی کل شامل جمع هامیلتونی هادیها، نقطه کوانتومی (کانال) و هامیلتونی تونلزنی هامیلتونی هادی به نقطه کوانتومی و برعکس) است [۷ و ۹].  $H = H_{L} + H_{R} + H_{D} + H_{T}$  (۲) هامیلتونی هادی سمت راست و چپ به شکل زیر نوشته می شود:  $H_{\alpha} = \sum_{k,\alpha,\alpha\in L_{R}} (\varepsilon_{k\alpha\alpha} \hat{c}_{k\alpha\alpha})$  (۳)

معرف هادي چي و lpha=R معرف هادي راست است. lpha=L



شکل ۳ : سامانه یک نقطه کوانتومی متصل به دو هادی.

**چگالی حالت الکترونی** چگالی حالتها اساساً تعداد حالتهای مختلف در یک سطح انرژی خاص است که الکترونها اجازه دارند آنها را اشغال کنند، بر اساس تابع گرین به صورت زیر محاسبه می شود [۹]: (۱۱) (۱۱) (۱۱) (۱۱) در این محاسبه ۷۹(۱= ۵٫۵، ۷۹۶ = ۳٫۵ هر) و هادی های در این محاسبه ۷۹(۱= ۵٫۵، ۷۹۶ = ۷٫۵ هر) و هادی های فلزی شامل یک سری تراز یکنواخت با فاصله ۴۰۰۱×۲/۴ در بازه انرژی ۱- تا ۱۹۷۲ با قدرت تونل زنی ۲۳ ۳ ۲ = ۲ در نظر گرفتیم. این دو قله حاصل شد که به قلههای کوندو معروف اند و نشان می دهد محاسبات انجام شده درست است.



شکل ۴: چگالی حالات برحسب انرژی با در نظر گرفتن U = ۳٫۶ eV.

#### عدد اشغال

در زبان کوانتش دوم، به جای تعیین حالت هر ذره، با تعداد ذرات در هر حالت سر و کار داریم. در این صورت برحسب تابع گرین، چشمداشتی عدد اشغال به شکل زیر محاسبه می شود [۹]:  $\langle n_{\sigma} \rangle = \frac{1}{\gamma_{\pi}} \int dE \ G_{\sigma}^{R}(E) G_{\sigma}^{A}(E) [\Gamma_{L} f_{L} + \Gamma_{R} f_{R}]$  (۱۲) که در آن ( $\sum_{0}^{\alpha} \sum_{0}^{\alpha} \sum_$  هامیلتونی نقطه کوانتومی عبارت است از:

$$H_{D} = \sum_{\sigma} \varepsilon_{d} \hat{n}_{d\sigma} + U \hat{n}_{d\sigma} \hat{n}_{d-\sigma} \tag{(f)}$$

در بهایت برای هامیلتونی فسمت تونلزنی داریم:  

$$H_T = \sum \tau (\hat{d}^{\dagger}_{\sigma} \hat{c}_{k\sigma\sigma} + \hat{c}^{\dagger}_{k\sigma\sigma} \hat{d}_{\sigma})$$
(۵)

در حالت کلی ۲ می تواند وابستگی به k و α داشته باشد اما به دلیل سادگی ما مستقل فرض می کنیم.

## نظريه معادله حركت

یک رویکرد در محاسبه تابع گرین غیرتعادلی، روش معادله حرکت است. با این روش توابع گرین مربوطه را بر حسب توابع درجه بالاتر گرین بیان میکنیم و با تقریبهایی از جمله نظریه میدان میانگین معادلات را به صورت تقریبی حل میکنیم؛ معادله حرکت در نمایش زوبارف برای نقطه کوانتومی به صورت زیر محاسبه میشود [۸]:  $(F) \langle \langle \sigma | \sigma \rangle \rangle + U \langle \langle \sigma | \sigma \rangle \rangle = 1 + \sum \langle \langle \sigma | \sigma \rangle \rangle + U \langle \langle n - \sigma d_{\sigma} | \delta_{\sigma} \rangle \rangle$   $(F) \langle \delta | \sigma | \sigma \rangle \rangle = 1 + \sum Z \langle z_{i} : i + z_{i} \rangle$  مربوط به نقطه کوانتومی  $\sum \langle \langle \delta | \sigma | \sigma \rangle \rangle = 0$  تابع گرین تأخیری مربوط به نقطه کوانتومی  $(F) | m = 0, \quad (F)$ است. معادله حرکت برای جمله دوم رابطه (۶) به قرار زیر است:  $(F) \langle \delta | \sigma | \sigma \rangle \rangle = \sum \tau \langle \langle \delta | \sigma | \sigma \rangle \rangle$ 

از جایگذاری رابطه (۷) در رابطه (۶) خود انرژی سامانه <sub>0</sub>∑ به صورت زیر تعریف میشود:

$$\Sigma_0 = \sum_{k,\alpha} \frac{\left|\tau\right|^2}{\left(E - \varepsilon_{k,\alpha} + i\eta\right)} \tag{A}$$

معادله حرکت برای جمله سوم رابطه (۶) به قرار زیر است:  $(E - \varepsilon_0 - U + i\eta) \langle \langle n_{-\sigma} d_{\sigma} | d_{\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle = \langle n_{-\sigma} \rangle \qquad (\mathbf{q})$   $+ \sum \tau \left( \langle \langle c_{k\sigma,a} n_{-\sigma} | d_{\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle + \langle \langle d_{-\sigma}^{\dagger} c_{k-\sigma,a} d_{\sigma} | d_{\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle - \langle \langle c_{k-\sigma,a}^{\dagger} d_{-\sigma} d_{\sigma} | d_{\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle \right)$ 

به علت این که در محدوده بالاتر از دمای کوندو کار میکنیم از جمله دوم داخل پرانتز معادله (۹) صرف نظر میکنیم. همچنین جمله سوم فقط در ابرساناها تعریف میشود، بنابراین از این جمله هم صرف نظر میکنیم [۷]. برای جمله اول از تقریب میدان میانگین استفاده میکنیم، بنابراین تابع گرین غیرتعادلی به شکل زیر نوشته میشود:

$$G_{\sigma}^{R}(E) = \left\langle \left\langle d_{\sigma} \mid d_{\sigma}^{\dagger} \right\rangle \right\rangle = \frac{E - \varepsilon_{0} - U(1 - \left\langle n_{-\sigma} \right\rangle)}{(E - \varepsilon_{0})(E - \varepsilon_{0} - U) + \sum_{0} (E - \varepsilon_{0} - U(1 - \left\langle n_{-\sigma} \right\rangle))} \xrightarrow{(1 \cdot )}$$





شکل ۷: نمودار ترابرد برحسب انرژی به ازای قدرت تونلزنی متفاوت.

اشغال بدست آمد نشان داد روش محاسباتی درست است. از محاسبه ترابرد به ازای دافعه کولنی برابر ۳٫۶ eV و با مقدار تونلزنی برابر ۲meV که تقریباً انرژی خورشید تأمین کرده است حداکثر عبور یعنی یک حاصل شد و با محاسباتی که دیگران انجام داده بودند مطابقت دارد، بنابراین از این ماده میتوان در سلول خورشیدی استفاده کرد، همچنین میتوان نتیجه گرفت محاسبه تابع گرین غیرتعادلی با روش نظریه معادله حرکت رویکرد خوبی برای محاسباتی همچون چگالی حالتها، عدد اشغال و ترابرد است.

مرجعها

- [1] Meley, Hugo, et al., "Strain tuning of inter-orbital correlations in LaVO<sub>3</sub> thin films", *Physical Review* B 103, 12 (2021) 125112.
- [Y] Rühle, Sven. "Tabulated values of the Shockley–Queisser limit for single junction solar cells", *Solar energy* 130 (2016) 139-147.
- [٣] Wang, Lingfei, et al., "Device performance of the Mott insulator LaVO<sub>3</sub> as a photovoltaic material", *Physical Review Applied* 3, 6 (2015) 064015.
- [\*] Dixit, Himanshu, Deepak Punetha, and Saurabh Kumar Pandey, "Performance investigation of Mott-insulator LaVO<sub>3</sub> as a photovoltaic absorber material", *Journal of Electronic Materials* 48, 12 (2019) 7696.
- [Δ] Scalettar, Richard T, "An introduction to the Hubbard Hamiltonian", *Quantum Materials: Experiments and Theory* 6 (2016).
- [9] Kropf, Chahan M., et al., "Towards high-temperature coherenceenhanced transport in heterostructures of a few atomic layers", *Physical Review B* 100, 3 (2019) 035126.
- [v] Verma, Sachin, "A Strongly Correlated Quantum-Dot Heat Engine with Optimal Performance: An Non-equilibrium Green's function Approach", arXiv preprint arXiv: 2208.06686 (2022).
- [A] Zubarev D, "Two-time Green's functions in statistical physics", Uspekhi Fizicheskih Nauk 71 (2014) 71.
- [4] Datta Supriyo, "Quantum *Transport:Atom to Transistor*", Cambridge University Press, 1st ed. (2005).
- [1] Sachs, Mendel and Sachs H, "Solid State Theory", Dover Publications, (1963).



شکل ۵ : نمودار میانگین عدد اشغال برحسب انرژی با نیروهای دافعه کولنی متفاوت. میزان گاف انرژی باعث تغییر در عرض نمودار میشود.

ترابرد الكتروني

به میزان الکترونهایی که بوسیله انتشار میان دستگاه از منبع به خروجی (درین) منتقل میشوند ترابرد الکترونی میگویند. به کمک رد (تریس) تابع گرین طبق رابطه زیر محاسبه می شود [۹]: (۱۳) (۱۳) (۱۳) انرژی خورشید باعث می شود الکترون و حفره در کانال ایجاد شده انرژی خورشید باعث می شود الکترون و حفره در کانال ایجاد شده و به سمت هادیها تونل بزنند. قدرت تونلزنی را از نتایج مراجع دیگر استفاده کردیم و با آن به محاسبه ترابرد پرداختیم [۶]. در شکل ۶ نمودار رسانندگی برحسب میزان تونلزنی آورده شده است همان طور که مشاهده میشود در زمانی که هیچ نقصی در شبکه وجود نداشته باشد، یعنی به هر میزان الکترونی که وارد نقطه کوانتومی میشود به همان میزان خارج شود، حداکثر مقدار تونلزنی کوانتومی است.

## نتيجه گيرى

ماده لانتانیوم وانادیوم اکساید چون ماده همبسته قوی بود توانستیم مدل هابارد را به کار ببریم؛ نتایجی که برای چگالی حالتها و عدد



شکل ۶: رسانندگی برحسب قدرت تونلزنی به ازای دافعه کولنی متفاوت [۶].





# نوسانات وزیکولهای لیپیدی در اثر افزایش دما با استفاده از شبیهسازی دینامیک مولکولی در شتدانه

## قنبری کاشان، سمانه؛ نیکوفرد، نرگس

پژوهشکاده علوم و فناوری نانو، دانشگاه کاشان، کاشان

#### چکیدہ

نوسانات وزیکولهای لیپیدی در بحث پایداری پوششهای لیپیدی مانند غشای دولا به لیپیدی ویروس ها بسیار مهم هستند. اغلب ویروس ها دارای غشا هستند و در از اثر ورود به بدن انسان، سیستم ایمنی بدن، آنها را شناسایی نمیکند و درون وزیکول یا همان غشا به تکثیر خود ادامه می دهند. ایس غشاها به شدت به حرارت حساس هستند و بنابراین تجزیه و تحلیل کمی افزایش نوسانات وزیکولهای لیپیدی در اثر افزایش دما که منجر به پارگی ایس غشاها به شدت به حرارت شود، حائز اهمیت است. در این تجزیه و تحلیل کمی افزایش نوسانات وزیکولهای لیپیدی در اثر افزایش دما که منجر به پارگی ایس غشاها و در نتیجه نابودی ویروس شود، حائز اهمیت است. در این تجزیه و تحلیل کمی افزایش نوسانات وزیکولهای لیپیدی در اثر افزایش دما که منجر به پارگی ایس غشاها و در نتیجه نابودی ویروس شود، حائز اهمیت است. در این تحقیق با استفاده از روش شبیه مازی دینامیک مولکولی درشت دانه تأثیر افزایش دما روی پایداری وزیکولهای لیپیدی بررسی شد. دو وزیکول متفاوت در نظر گرفته شد. وزیکول اول بصورت تکلیپید DOPC و وزیکول دوم شامل دو نوع لیپید (DPC ٪ ۲۰۲۸ و DOPC ٪ ۵۰ است. با افزایش دما وزیکول متفاوت در نظر گرفته شد. وزیکول اول بصورت تکلیپید DOPC و وزیکول دوم شامل دو نوع لیپید (DPC ٪ ۵۰ ایل است. با افزایش می وزیکول اول بصورت تکلیپید DOPC و وزیکول دوم شامل دو نوع لیپید (DPC ٪ ۵۰ ایل است. با افزایش دولی مان ما مان دو نوع لیپید (DPC ٪ ۵۰ ایل است. با افزایش دی افزایش دی بایک دو و با گذشت زمان افزایش می باد که شعاع وزیکول ایل آول به وازیش می باد که با توجه به انبساط گرمایی قابل توجه است. نوسانات سطح ایس وزیکول با گذشت زمان افزایش می باد که نمای دولی مر ما منده شده ما منده می ما در مای مانده میده مینور می ما در مان کونایم معود ایستان و درمان و نوریکول در مای بایده میده ایل آن به واپاشی در زمانهای طولانی تر است. اما وزیکول دولیپیدی در زمان کوتاهی تعیر ساح و مر فری و در مون و نوریکول دولیپیدی در زمان کوتهی تعیه میده و در ما و مانه دوله بنده می ما و زیکول دولیپیدی در زمان کوتاهی تعیه میده در در مان و نوریکول دولیپید و نوری و نوری و در و ویزیکو دوله و ساختاری در می مینیده در ما میده ده ده مان خان می مایند. می ماین می مایل که می باین غشای دولا به نیست. ما و نوریکو یک کیپیدی و کیپیدی در در مای باین غشای می و ی بولی و مانه و در

# Fluctuations of lipid vesicles due to temperature increase using coarse-grained molecular dynamics simulation

#### Ghanbari-Kashan, Samaneh; Nikoofard, Narges

Institute of Nanoscience and Nanotechnology, University of Kashan, Kashan

#### Abstract

Fluctuations of lipid vesicles are very important in discussing the stability of lipid envelopes such as the lipid bilayer membrane of viruses. Most viruses have a membrane, and upon entering the human body, the immune system does not recognize them, and they continue to multiply inside the vesicle or membrane. These membranes are highly sensitive to heat, and therefore, it is important to quantitatively analyze the increase in fluctuations of lipid vesicles due to the increase in temperature, which leads to the rupture of these membranes and, as a result, the destruction of the virus. In this research, the effect of increasing temperature on the stability of lipid vesicles was investigated using the coarse-grained molecular dynamics simulation method. Two different vesicles were considered. The first vesicle is a monolipid DOPC and the second vesicle contains two types of lipids (DLPC 46/38% and DOPC 53/62%). With increasing temperature, it was observed that the radius of monolipid vesicle increases, which can be justified due to thermal expansion. Fluctuations in the level of this vesicle changes its structure in a short time and forms a tangled structure of nanofibers, which, of course, has many fluctuations. This indicates that the preferred structure for the bilipid studied at high temperature is not a bilayer membrane. Also, the calculations based on the simulations show that the flip-flop rate in the monolipid vesicle increases with time.

Keywords: Lipid vesicle, Membrane of virus, Simulation, High temperature, Fluctuations, Flip-Flop.

PACS No. 87, 89



#### مقدمه

بررسی پایداری ویروس ها در شرایط محیطی متف اوت برای وضع دستورهای بهداشت عمومی حائز اهمیت است. پوشش اغلب ویروس ها از جنس دولایه لیپیدی است که می توان یک وزیکول را به عنوان مدل ساده شده آن در نظر گرفت.

از روش های شبیه سازی دینامیک مولکولی برای مطالعه روی حرکتهای درون مولکولی استفاده می شود. مطالعاتی در زمینه روش های شبیه سازی دینامیک مولکولی در شت دانه تشکیل، ساختار و دینامیک غشاهای لیپیدی یا همان وزیکول های لیپیدی منتشر شده است [۱و۲]. همچنین مطالعاتی در زمینه ایجاد حفره در وزیکول های لیپیدی در اثر اعمال تنش مثل امواج ضربه [۳]، برهمکنش با نانوذرات [٤] و .... منتشر شده است.

افزایش دمای سطح وزیکولهای لیپیدی می تواند عامل دیگری برای ایجاد تنش و پارگی وزیکول باشد در واقع افزایش دما باعث افزایش نوسانات گرمایی سطح وزیکول می شود. همچنین این وزیکولها که خود بصورت دولایه لیپیدی هستند از فسفولیپیدها که جزء ساختاری اصلی غشای سلولی هستند، ساخته شدهاند. یکی از اثرات متداول در غشای دولایه، پدیده فلیپ-فلاپ است. در این پدیده، سر آبدوست یک مولکول فسفولیپید از محیط آبگریز بین دولایه عبور می کند و از یک لایهی غشا به لایهی دیگر غشا می پرد که این از نظر انرژی مطلوب نیست. اصولا این پدیده هم ناشی از نوسانات گرمایی است. با این حال، زمان مشخصه رخ دادن پدیده فلیپ-فلاپ نسبت به نوسانات گرمایی لیپیدها داخل هر لایه نوسانات وزیکول و یافتن متوسط زمان پدیده فلیپ-فلاپ به عنوان زمان مشخصه تلاش برای ایجاد حفره و در نهایت پارگی وزیکولها، شبیهسازی در دمای بالا انجام شد.

#### روش کار شبیهسازی

مرحله اول شبیهسازی، آماده کردن یک ساختار اولیه به عنوان نقطه شروع است. با مراجعه به سایت CHARMM-GUI می توان به ساختارهای مدلسازی شده دست یافت. یکی از این ساختارها وزیکولها هستند. به همین منظور دو وزیکول متفاوت در نظر گرفته شد. وزیکول اول بصورت تکلیپید DOPC و وزیکول دوم

شامل دو نوع لیپید (DLPC ٪۶۲/۳۸ و DOPC ٪۵۳/۲۲) که هـر دو با شعاع ۱۰۰ آنگستروم همراه با یک لایـه آب بـا ضـخامت ٤٠ آنگستروم و ذرات یون سدیم و کلر در دمای ۳۰۳/۱۵ کلـوین (۳۰ درجهی سلسیوس) انتخاب و در جعبه شبیهسازی بـه انـدازه ۳۲۰ آنگستروم قرار داده شدند.

انتخاب نوع لیپیدها در این شبیه سازی بر این اساس است که پایداری حفره ایجاد شده در وزیکول های لیپیدی به نسبت حجم نسبی بین سر آبدوست لیپید و دم آبگریز آن بستگی دارد. در واقع لیپیدهایی که نسبت حجم سر آبدوست آن نسبت به دم آبگریز آنها بیشتر است حفره های پایدار تشکیل می دهند، در حالی که لیپیدهایی که نسبت حجم سر آبدوست آن نسبت به دم آبگریز آنها کمتر است حفره های ناپایدار تشکیل می دهند. لیپید DLPC تشکیل حفره پایدار می ده د ولی لیپید DOPC تشکیل حفره ناپایدار می دهد [٥].

در مرحله دوم شبیهسازی باید یک میدان نیروی مناسب انتخاب شود. در شبیهسازی مورد بحث، از میدان نیروی مارتینی جهت شبیهسازی درشت دانه استفاده شد. میدانهای نیروی مارتینی انواع متفاوتی دارند. در اینجا از میدان نیروی مربوط به وزیکولهایی که صرفاً از لیپید هستند و دانههای آب را غیرقطبی در نظر گرفته است، استفاده شد و اجرای شبیهسازی مورد نظر توسط نرمافزار NAMD انجام شد.

بعد از انتخاب ساختار مناسب، سعی می شود که انرژی ساختار وزیکول به کمترین حد خود برسد. چون سرعت ابتدایی هر کدام از اتمهای تشکیل دهنده وزیکول به شکل تصادفی در دماهای کم (دمای ۳۰ درجه سلسیوس) مشخص است به همین دلیل، اجرای شبیه سازی با همان شرایط اولیه حدود ۲۰۰۰۰ گام که هر گام ۱۰ فمتوثانیه است، انجام شد. در این حالت، تمامی اتمهای ساختار وزیکولی در پایین ترین انرژی قرار می گیرند به این مرحله از شبیه سازی مینی مم کردن سیستم می گویند. برای بررسی تأثیر گرما روی ساختار وزیکول، دما از ۳۰ درجه سلسیوس به ۸۰ درجه سلسیوس افزایش یافت و شبیه سازی حدوداً برای هفت میلیون گام (۷۰ نانوثانیه) انجام شد. در این حالت سرعتهای بعدی اتمها به ترتیب در دماهای بالا مشخص می شوند و شبیه سازی تا جایی انجام می گیرد که به دمای مورد نظر برسد. در نهایت موقعیت



ذرات در فواصل زمانی ۵۰۰ گام ذخیره و بـرای یـافتن کمیتهـای مورد نظر تحلیل میشوند.

## نتايج تحليل دادههای شبيهسازی

در طول زمانی که شبیهسازی انجام می شود، روند تغییرات ساختاری در وزیکول ایجاد می شود که چگونگی این تغییرات، منعکس کننده دینامیک وزیکول است. شکل های ۱ و ۲ نوسانات و تغییرات شدید را به ترتیب در ساختار وزیکول های تک لیپید و دولیپید نشان می دهند.



شکل ۱ : نوسانات در شکل و شعاع وزیکول تکلیپید در اثر افزایش دما.



شکل ۲ : ناپایداری وزیکول دولیپید و تغییرات شدید در ساختار وزیکول در اثر افزایش دما.

در شکل ۱ مشاهده می شود با گذشت زمان و با افزایش دما، شکل و شعاع وزیکول تکلیپیدی دچار نوسان می شوند و این نوسانات به گونهای است که منجر به متورم شدن وزیکول می شود. اما در شکل ۲ با افزایش دما تغییرات شدیدتری در ساختار وزیکول دولیپیدی رخ می دهد که ساختار وزیکولی را ناپایدار می کند و نشان می دهد که نانوساختار مطلوب برای این نوع لیپیدها، غشای دولایه نیست بلکه نانوفیبر با خمیدگی زیاد است.

نمودار شعاع متوسط به همراه نمودار انحراف معیار آن به ترتیب برای وزیکول تکلیپید و دولیپید در شکلهای ۳ و ٤ بصورت زیر آمده است.





در شکل ۳-الف میانگین شعاع وزیکول تکلیپید با زمان ثابت نمی شود و افزایش می یابد که این نشان می دهد وزیک ول ناپایدار است. یعنی وزیکول بر اثر افزایش دما دچار انبساط گرمایی شده و به سمت واپاشی می رود که با ادامه روند شبیه سازی امکان دارد بتوان نوسانات شدیدتر و واپاشی وزیک ول را دید. همچنین در شکل ۳-ب انحراف معیار با زمان افزایش می یابد که به معنای افزایش نوسانات با زمان است که میانگین دامنه نوسانات آن وریک ول افزایش نوسانات با زمان است که میانگین دامنه نوسانات آن پارامتر شعاع معنایی ندارد و از این جهت نمی توان نمودار شعاع و همینطور انحراف معیار را تفسیر کرد. به طور کلی این موارد نشان می دهند که نوع لیپید و تعداد آن در حفظ ساختار وزیک ولی مهم مستند.

همچنین یک پارامتر مهمی که قبلا هم به آن اشاره شد زمان مشخصه رخ دادن پدیده فلیپ-فلاپ است. برای وزیکول تکلیپید نمودار تعداد دفعات تکرار این پدیده برای هر لیپید در کل زمان شبیهسازی، رسم شد که در شکل ۵ نشان داده شده است.



شکل ۵ : نرخ پدیده فلیپ-فلاپ بر حسب زمان در وزیکول تکلیپید الف) نمودار تعداد دفعات فلیپ-فلاپ در واحد زمان به کل لیپیدهای وزیکول ب) نمودار میانگین پنجرهای از دادههای نمودار ۵-الف با اندازه پنجره ۰۰۰.

نمودارهای شکل ۵ نرخ پدیده فلیپ-فلاپ برحسب زمان در وزیکول تکلیپیدی را نشان می دهند. شکل ۵-الف تعداد دفعات این پدیده در واحد زمان نسبت به کل لیپیدهای موجود در وزیکول تکلیپیدی را محاسبه می کند و نشان می دهد چه کسری از لیپیدها بین دولایه وزیکول جابهجا شده است. شکل ۵-ب نمودار میانگین پنجرهای از دادههای نمودار ۵-الف با اندازه پنجره ۰۰۰ را نشان می دهد که با گذشت زمان این مقدار افزایش می یابد. دلیل بالا بودن نرخ پدیده فلیپ-فلاپ در وزیکول تکلیپیدی این است که با گذشت زمان، افزایش دما رخ داده است و در دمای بالا کلیه حرکات گرمایی از جمله فلیپ-فلاپ با سرعت بالایی رخ می دهند.

#### نتيجهگيرى

نوسانات گرمایی و پدیده فلیپ-فلاپ در دو وزیکول با ترکیب لیپیدی متفاوت با استفاده از روش شبیهسازی دینامیک مولکولی درشتدانه مطالعه شد. وزیکول اول بصورت تکلیپید DOPC و وزیکول دوم شامل دو نوع لیپید (DLPC ٪۲۸۸ و کار کار کار نظر گرفته شدند. گرما در وزیکول مالاپ می (۵۳/۹۲) در نظر گرفته شدند. گرما در وزیکول تکلیپیدی که پایدارتر است، موجب تورم وزیکول و همچنین افزایش نوسانات گرمایی و افزایش آهنگ رخ دادن پدیده فلیپ-زمان افزایش می یابد که نشاندهنده تمایل وزیکول به واپاشی در زمان افزایش می یابد که نشاندهنده تمایل وزیکول به واپاشی در تغییر کلی در ساختار وزیکول می شود که در زمان کوتاهی ساختاری درهم تنیده از نانوفیبرها را تشکیل می دهد که البته نوسانات زیادی دارد. این نشان می دهد که ساختار مطلوب برای

#### مرجعها

- D. J. Smith, J. B. Klauda and A. J. Sodt; "Simulation best practices for lipid membranes"; *Living Journal of Computational Molecular Science* 1, No. 1 (2019) 5966-5966.
- [2] A. H. Larsen; "Molecular Dynamics Simulations of Curved Lipid Membranes"; International Journal of Molecular Sciences 23, No. 15 (2022) 8098.
- [3] Y. Sliozberg and T. Chantawansri; "Damage in spherical cellular membrane generated by the shock waves: Coarse-grained molecular dynamics simulation of lipid vesicle"; *The Journal of chemical physics* 141, No. 18 (2014) 184904.
- [4] M. Das, U. Dahal, O. Mesele, D. Liang and Q. Cui; "Molecular dynamics simulation of interaction between functionalized nanoparticles with lipid membranes: Analysis of coarse-grained models"; *The Journal of Physical Chemistry B* 123, No. 49 (2019) 10547-10561.
- [5] C. L. Ting, N. Awasthi, M. Müller and J. S. Hub; "Metastable prepores in tensionfree lipid bilayers"; *Physical review letters* 120, No. 12 (2018) 128103.





# بررسی تاثیر آلایش نیکل بر روی ویژگی های ساختاری و نوری نانو میله های اکسید روی

فتحى، سياوش ؛ اصلى بيكى، باقر

دانشکده فیزیک دانشگاه تبریز ، تبریز

#### چکیدہ

کترل و ایجاد تغییرات در ساختار و خواص نوری نانومیله های اکسید روی با استفاده از آلایش، نکته کلیدی مهمی جهت افزایش عملکرد دستگاه های الکترونیکی، ابتیکی و فوتوکاتالیستی می باشد که بر پایه این نانوساختار ها ساخته می شوند. در این تحقیق نانومیله های اکسید روی خالص و آلایش یافته با نیکل به روش گرما آبی تهیه و به بررسی و مقایسه خصوصیات ساختاری و نوری آن ها با یکدیگر پرداخته شده است. با استفاده از دستگاه های پراش اشعه ایکس، طیف سنجی فرابنفش - مرئی، طیف سنجی فوتولومینسانس و میکروسکوپ الکترونی رویشی گسیل میدانی مشخصه یابی نمونه ها انجام گرفت. تنایج نشان می دهد که ویژگی خالب مرئی، طیف سنجی فوتولومینسانس و میکروسکوپ الکترونی رویشی گسیل میدانی مشخصه یابی نمونه ها انجام گرفت. تنایج نشان می دهد که ویژگی خالص ۲۸۶/۲ نانومتر و برای اکسید روی آلایش یافته با نیکل ۲۵۸/۷ نانومتر اندازه گیری شد، شدت قله های فوتولومینسانس در محدوده فرابنفش برای اکسید روی خالص ۲۸۶/۲ نانومتر و برای اکسید روی آلایش یافته با نیکل ۲۵۸/۷ نانومتر اندازه گیری شد، همچنین شکاف انرژی برای اکسید روی خالص و آلایش یافته با نیکل به ترتیب ۲۸۶/۲ و ۲/۱۱ الکترون ولت اندازه گیری شد. در مورد بررسی ساختار نانومیله ها توسط پراش اشعه ایکس هر دوی خالیش یافته با باشند و فاز ثانویه مربوط به اکسید روی آلایش یافته با نیکل ۲۵۸/۷ نانومتر اندازه گیری شد، همچنین شکاف انرژی برای اکسید روی ساختار ورتزیت می باشند و فاز ثانویه مربوط به اکسید نیکل تشکیل نمی شود. همچنین در آنالیز ریخت شناسی با توجه به تولیر میکروسکوپ الکترونی رویشی گسیل میدانی، طول نانومیله اکسید روی خالص ۲۹۸ نانومتر و نمونه آلایش یافته ۲۰۱۱ نانومتر محاسبه شد که نشان دهنده تغییر در طول نمونه آلایش یافته ما

# Investigating the effect of Ni doping on the structural and optical properties of ZnO nanorods

#### Fathi, Siavash ; Aslibeiki, Bagher

Department of Physics, University of Tabriz, Tabriz

#### Abstract

Controlling and creating changes on the structural and optical properties of ZnO nanorods is an important key to increase the performance of electronical, optical and photocatalytical devices that are made based on these nanostructures. In this research, pure and Ni doped ZnO nanorods were prepared by hydrothermal method and we investigated and compared their structural and optical properties with each other. Characterization was done using x-ray diffraction, ultraviolet-visible spectroscopy, photoluminescence spectroscopy and field emission scanning electron microscopy. The results show that the optical properties of the doped sample are affected compared to the pure ZnO sample, photoluminescence peaks in Uv region were 384/63 nm for pure ZnO and 388/52 nm for Ni doped ZnO, also band gap energy calculated 3/24 and 3/11 for pure ZnO and Ni doped ZnO respectively, regarding the phase analysis of nanorods by x-ray diffraction, both samples have a wurtzite structure and the secondary phase related to NiO is not formed. Also in the morphological analysis according to the field emission scanning electron microscope images, length of nanorods calculated 798 nm for Pure ZnO and 501 nm for Ni doped ZnO nanorods, that shows the changes in the length of the doped sample. **Keywords**: ZnO, Doping, Nanorods, Optical properties, Structural properties.

PACS No.(61, 78)

اکسید روی بطور ذاتی یک نیم رسانا نوع n و مابین نیمرساناهای یونی و کوالانسی طبقه بندی می شود و دارای شکاف انرژی ۳/۳۷ الکترون ولت و انرژی بستگی اکسایتونی بالا با مقدار ۲۰ میلی

مقدمه



مدت ۱ ساعت در دمای ۳۵۰ درجه سانتی گراد در کوره قرار گرفتند. برای تهیه محلول رشد نانومیله های اکسید روی از پیش ماده های نیترات روی چهار آبه، هگزا متیلن تتراآمین و نیترات نیکل شش آبه استفاده شد. در مرحله آخر محلول ۲۰ میلی لیتری از ترکیب پیش ماده های ذکر شده و آب تهیه شد. سپس محلول های رشد در تفلون ریخته شدند و سپس زیر لایه ها بصورت غوطه ور در آن قرار گرفتند سپس در اتوکلاو و در آون با دمای اتمام این مراحل اکسید روی خالص و نمونه آلایش یافته آن با نیکل دوباره به مدت نیم ساعت در دمای ۲۰۰ درجه سانتی گراد المام این مراحل اکسید روی خالص و نمونه آلایش یافته آن با در کوره قرار گرفتند. نمونه ها توسط دستگاه میکروسکوپ الکترونی روبشی، پراش اشعه ایکس و طیف سنجی مرئی-فرابنفش و همچنین فوتولومینسانس مورد مطالعه قرار گرفتند.

## نتايج و بحث

همانطور که در طرح پراش اشعه ایکس نمونه ها در شکل ۱ مشاهده می شود، محدوده زاویه ی ۲۰ الی ۳۰ نمایانگر قله ی پهن مربوط به زیر لایه شیشه ای کوارتز (آمورف) می باشند. مشاهده شد که قله ها برای نمونه اکسید روی خالص در زوایای ۳۱٬۷۰ و ۳٤/٤٣ به ترتيب مربوط به صفحات (۱۰۰)، (۰۰۲) وجود دارند که قله ی موجود در زاویه ۳٤/٤۳ برای هر دو نمونه بطور یکسان آشکار گردیده و برای نمونه اکسید روی آلایش یافته با نیکل، قله در زاویه ی ۲۲/۹۸ که مربوط به صفحه ی (۱۰۳) می باشد نیز ظاهر گردید. در تحلیل فازی پراش اشعه ایکس مربوط به نمونه آلایش یافته هیچ گونه فاز ثانویه مشاهده نگردید که بیانگر این موضوع است که اتم نیکل بخوبی در ساختار اکسید روی جای گرفته است. همچنین قله پراش مربوط به صفحه ی (۰۰۲) که دارای بیشترین شدت در هر دو نمونه می باشد نمایانگر جهت رشد يكسان نانوميله ها در جهت محور C مي باشد. در اين تحلیل موقعیت و شدت نسبی قله های پراش اشعه ایکس مربوط به نمونه ها با کد مرجع ۱۶۶۳-۹۶–۹۰ ۹۰ برای اکسید روی مطابقت دارند.

در بررسی ریخت شناسی نمونه ها همانطور که در شکل ۲ برای هر دو نمونه مشاهده می شود، تغییراتی در ریخت شناسی نمونه ی

الکترون ولت در دمای اتاق می باشد. از بین تمامی نانوساختار های اکسید روی، نانومیله های اکسید روی توجه خاصی را بخود جلب کرده اند که این توجه ناشی از کاربرد های کلیدی این نانو ساختار در ساخت ادوات الکترونیکی و اپتیکی حساس می باشد[۱]. کنترل و ایجاد تغییرات ساختاری و نوری در نانومیله های اکسید روی خالص بواسطه آلایش آن ها فرصت های بسیاری را در ساخت نسل جدیدی از دستگاه های مولد انرژی، فوتوكاتاليستي، الكترونيكي و اپتيكي و ايجاد مي كند[٢, ٣]. در سال های گذشته با ظهور علوم و فناوری نانو روش گرماآبی که یکی از روش های پایین به بالا در تهیه نانوساختارها محسوب می شود. بعلاوه اینکه با توجه به زیست سازگاری و ساده و مقرون بصرفه بودن این روش برای تولید نانومیله ها بیشتر از سایر روش ها مورد توجه قرار گرفته است[٤]. علاوه بر این موضوع حسگرهای تشخیص دهنده ی گاز های آتش زا و منفجره که در دمای اتاق کار می کنند کاربرد وسیعی به آلایش عناصر فلزی واسطه در نانومیله های اکسید روی داده اند[٥]. تحقیقی نشان داده است که نانومیله های اکسید روی آلایش یافته با نیکل گذردهی دی الکتریک لایه های نازک اکسید روی را در مقابل تابش فرابنفش بالا می برند[7]. در تحقیقی نشان داده شده است که میزان مشخصه ولتاز – جریان نانومیله های اکسید روی با افزایش غلظت آلایش نیکل از ۲٪ الی ۲٪ افزایش می یابد[۷]. بعلاوه تحقیقاتی بر روی آلایش نانومیله های اکسید روی با نیکل جهت کاربرد در دستگاه های آشکار ساز نوری که در محدوده فرابنفش کار میکنند نیز صورت گرفته است و دستگاه ساخته شده حساسیت نوری بالاترى نسبت به نانوميله هاى اكسيد روى خالص ارائه داده است[۸]. در این پژوهش در ابتدا نانومیله های اکسید روی خالص و سپس نمونه ی آلایش یافته آن با نیکل با مقدار آلایش ٪۲ به روش گرماآبی ساخت و مورد مطالعه قرار گرفتند.

#### آزمايشات

برای تهیه نانومیله های اکسید روی ابتدا زیرلایه های شیشه ای کوارتز در حمام اولتراسونیک با استون و اتانول شستشو داده شدند. سپس لایه بذر به روش انباشت چرخشی از پیش ماده ی استات روی دو آبه و اتانول تهیه شد. لایه های بذر جهت اکسید شدن به

آلایش یافته نسبت به نمونه ی خالص بوجود آمده است که این تغییرات در طول نانومیله ها می باشد. طول نمونه ی آلایش یافته نسبت به نمونه خالص کاهش یافته است. اندازه طول نانومیله های اکسید روی خالص بطور متوسط ۷۹۸ نانومتر و برای نمونه ی آلایش یافته با نیکل ۰۱۱ نانومتر بدست آمد. همچنین قطر نانومیله ها برای نمونه ی نانومیله های اکسید روی خالص ۱۱٤ نانومتر و برای نانومیله های آلایش یافته با نیکل ۹۶ نانومتر محاسبه شد. جهت رشد هر دو نمونه بطور عمودی بر روی زیرلایه می باشد که این موضوع در توافق با نتیجه ای است که از طرح پراش برای هر دو نمونه بدست آمد.



شکل ۱ : طرح پراش اشعه ایکس مربوط به نانومیله های اکسید روی خالص(ZnO) و آلایش یافته با نیکل(Ni-ZnO).



شکل۲ : تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی مربوط به نانومیله های اکسید روی خالص (ZnO) و نانومیله های اکسید روی آلایش یافته با نیکل(Ni-ZnO).

در قسمت آزمایشات نوری، ابتدا آزمایش طیف سنجی فرابنفش – مرئی انجام شد و از نتایج آن شکاف انرژی با استفاده از رابطه تائوک برای هر دو نمونه ی نانومیله های اکسید روی خالص و آلایش یافته با نیکل به ترتیب ۳/۲٤ و ۳/۱۱ الکترون ولت محاسبه شد که شکل ۳ نمایانگر محاسبه شکاف انرژی برای هر دو نمونه از روی طیف فرابنفش – مرئی گرفته شده از آن ها می باشد.

در تحلیل فوتولومینسانس، طیف فوتولومینسانس هر دو نمونه با استفاده از برازش گوسی در شکل ٤ نمایش داده شده است، همانطور که مشاهده می شود شدت اولین قله برای نانومیله های اکسید روی خالص در ناحیه فرابنفش در طول موج ۳۸٤/٦۳ نانومتر و برای نانومیله ی اکسید روی آلایش یافته با نیکل در طول موج ۳۸۸/۵۲ مشاهده شد که شدت نمونه ی آلایش یافته نسبت به نمونه خالص بیشتر است. تفسیر این شدت در ناحیه ی فرابنفش بصورت کلی بدلیل بازترکیب اکسایتون های آزاد (جفت الکترون و باشد و در حالت کلی می توان گفت شدت فوتولومینسانس به چگالی اکسایتون های آزاد بستگی دارد و قله های رنگی دیگری که در شکل ٤ مشاهده می شود متعلق به بازه ۲۰۰ الی ۲۰۰ نانومتر باشند که بدلیل وجود نواقصات ذاتی از جمله تهی جای بودن اتم اکسیژن و روی مربوط به ساختار اکسید روی می باشند[۱].



شکل۳: شکاف انرژی محاسبه شده با استفاده از رابطه تانوک برای نانومیله های اکسید روی خالص (ZnO) و آلایش یافته با نیکل(Ni-ZnO).





ىرجعها

- [<sup>1</sup>]. Ayoub, I., et al., Advances in ZnO: Manipulation of defects for enhancing their technological potentials. Nanotechnology Reviews, 2022. 11(1): p. 575-619.
- [Y]. Sivalingam, Y., et al. Structural and optical correlation of Ni doped ZnO nanorods. in 2015 IEEE 15th International Conference on Nanotechnology (IEEE-NANO). 2015.
- [<sup>\*</sup>]. Xu, M., et al., Ni-doped ZnO nanorods gas sensor: Enhanced gas-sensing properties, AC and DC electrical behaviors. Sensors and Actuators B: Chemical, 2014. 199: p. 403-409.
- [<sup>\*</sup>]. Ghayour, H., et al., The effect of seed layer thickness on alignment and morphology of ZnO nanorods. Vacuum, 2011. 86(1): p. 101-105.
- [<sup>Δ</sup>]. Ahn, H., et al., Enhanced UV activation of electrochemically doped Ni in ZnO nanorods for room temperature acetone sensing. Chemical Physics Letters, 2011.
   511(4-6): p. 331-335.
- [<sup>7</sup>]. Water, W., C.-J. Li, and L.-W. Ji, Application of Ni-doped ZnO nanorods in surface acoustic wave ultraviolet photodetectors. Modern Physics Letters B, 2022. 36(10): p. 2141020.
- [<sup>V</sup>]. Salah, H.Y., et al ,.Influence of Nickel Concentration on the Microstructure, Optical, Electrical, and Photoelectrochemical Properties of ZnO Nanorods Synthesized by Hydrothermal Method. Journal of Electronic Materials, 2022. 51(2): p. 910-920.
- [<sup>A</sup>]. Chu, Y.-L., et al., Fabrication and Characterization of Ni-Doped ZnO Nanorod Arrays for UV Photodetector Application. Journal of The Electrochemical Society, 2020. 167(6): p. 067506.



شکل ٤ : طیف فوتولومینسانس مربوط به نانومیله های اکسید روی خالص(ZnO) و نانومیله های اکسید روی آلایش یافته با نیکل (Ni-ZnO).

## نتيجه گيرى

در مورد ویژگی های ساختاری نانومیله های اکسید روی آلایش یافته با نیکل می توان گفت که در تحلیل فازی که توسط پراش اشعه ایکس انجام شد در آن فاز ثانویه اکسیدی مربوط به نیکل مشاهده نشد و به معنی جاینشینی اتم های نیکل بجای اتم روی در ساختار اکسید روی می باشد. همچنین در تحلیل ریخت شناسی نمونه ها، تغییراتی محسوسی در طول نانومیله ها مشاهده گردید. علاوه بر این در مورد ویژگی های نوری نانومیله های اکسید روی خالص از جمله شدت فوتولومينسانس نمونه ي آلايش يافته مي توان گفت که اولین قله فوتولومینسانس در محدوده ی فرابنفش نسبت به نمونه خالص افزایش یافته است و همچنین با توجه به طيف فرابنفش – مرئى گرفته شده از نمونه ها و محاسبه شكاف انرژی ها از رابطه تائوک نتیجه شد که شکاف انرژی نمونه ی آلایش یافته با نیکل نسبت به نمونه ی خالص کاهش یافته است. در نتیجه با آلایش نیکل می توان تغییرات کنترل شده ای را به نانومیله های اکسید روی خالص در راستای کاربردهایی از جمله ديودهاي نوري، حسگرهاي گازي، نانوژنراتور ها و ساير کاربرد ها داد.




# محاسبهی خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی ترکیب Sr2RuO4 با استفاده از تقریب LSDA در حضور برهمکنش اسپین-مدار

يزدانى حميد ، مقداد ؛ مهرابى، وحيد ا

ا گروه فیزیک، دانشگاه آیت اله بروجردی، بروجرد، لرستان

چکی*د*ہ

در این مطالعه خواص ساختاری، الکترونی ومغناطیسی ترکیب Sr<sub>2</sub>RuO4 با استفاده از روش امواج تخت بهساخته خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه تابعی چگالی(DFT) با استفاده از کد محاسباتی Wien2k بررسی می شوند. کلیه ی خواص با استفاده از تقریب LSDA در حضور و غیاب برهم کنش اسپین-مدار محاسبه می شوند. نتایج ما نشان می دهند که ترکیب Sr<sub>2</sub>RuO4 یک رسانای فلزی غیر مغناطیسی می با شد. با توجه به عدم همخوانی مقدار گشتاور مغناطیسی کل با مقدار تجربی می توان نتیجه گرفت که تابعی LSDA پیش گویی مناسبی از خواص مغناطیسی این ترکیب به علت در نظر نگرفتن اثرات همبستگی ندارد. نمودار چگالی حالات جزئی ترکیب نشان از سهم عمده ی اوربیتال dx اتم Ru و اوربیتال 20 اتمهای اکسیژن صفحه ای در نزدیکی سطح فرمی دارد.

واژه های کلیدی: نظریه تابعی چگالی، Wien2k LSDA Sr2RuO4.

Calculation of structural, electronic and magnetic properties of Sr2RuO4 compound using LSDA approximation in the presence of spin-orbit interaction

#### Yazdani-Hamid, Meghdad<sup>1</sup>; Mehrabi, Vahid<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Ayatollah Boroujerdi University, Boroujerd, Lorestan

#### Abstract

In this study, the structural, electronic and magnetic properties of the  $Sr_2RuO_4$  compound are investigated using the full potential linearized augmented plane wave method in the framework of density functional theory (DFT) using the Wien2k computational code. All the properties are calculated using the LSDA approximation in the absence and presence of the spin-orbit interaction. Our results show that the compound  $Sr_2RuO_4$  is a nonmagnetic metallic conductor. Due to the inconsistency of the total magnetic moment with the experimental value, one can conclude that the LSDA function is not a good predictor of the magnetic properties of this compound due to not taking into account the correlation effects. The partial state density diagram has a combination of the major contribution of  $d_{xy}$  orbital of Ru atom and 2p orbital of planar atoms near the Fermi level.

Keywords: Density Functional Theory, Sr2RuO4, LSDA, Wien2k.

PACS No. 61, 71

ترکیب اولین ابررسانایی است که عنصر مس نداشته و هم ساختار با ابررساناهای مسی است. علاوه بر این، این ترکیب بدون جایگزینی هیچ عنصر دیگری ابررساناست[٤-١] . ترکیب فوق در حالت نرمال بهعنوان یک مایع فرمی معرفی می شود و دارای سه اوربیتال dxy و

در سالهای اخیر، ترکیب Sr2RuO4 در حالت نرمال و ابررسانایی مورد توجه بسیاری از پژوهشگران قرار گرفته است. این

مقدمه



dxz و dyz در سطح فرمی است. اوربیتالهای تکبعدی dyz و dxz تبهگن و در ویژگیهای تقارن با هم رفتار میکنند در حالیکه اوربیتال دوبعدی dxy بهصورت مستقل رفتار میکند مگر اینکه برهمکنش اسپین مدار در محاسبات وارد شود که در این صورت سه اوربیتال با هم جفت میشوند.

## روش محاسبات

محاسبات بر پایه نظریه تابعی چگالی و با بکارگیری روش امواج تخت بهساخته خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) و با استفاده از کد محاسباتی Wien2k انجام شده است [٥]. برای محاسبه انرژی تبادلی- همبستگی از تقریب LSDA استفاده شده است. پارامترهای بهینه شدهی محاسبات عبارتند از: ۸۸ یقطه در منطقه بهینه شدهی محاسبات عبارتند از: ۱۹۰۳ و ۲۱ یقطه در منطقه کاهش ناپذیر بریلوئن) تقسیم شده و ۱۰ یقطه (۲۸۸ نقطه در منطقه کاهش ناپذیر بریلوئن) تقسیم شده و ۱۰ یقطه (۲۸۸ یقطه در منطقه حالات مغزه از ظرفیت برابر با ۲- ریدبرگ و شعاع مافین تین اتمهای Sr مگرایی انرژی برابر با ۲۰۰۰ الکترون ولت در نظر گرفته شده است. محاسبات به صورت اسپین-قطبیده با و بدون در نظر گرفته اثر جفت شده گی اسپین مداری انجام شده است.

## خواص ساختارى

شکل (۱) ساختار مورد مطالعه را نشان میدهد. برای محاسبهی خواص ساختاری ترکیبهای با گروه فضایی تتراگونال و هگزاگونال بستهی جدیدی به نام 2D-optimize معرفی شده است [٦] که نتایج حاصل از آن در توافق بهتری با نتایج تجربی است. در این روش ابتدا مقدار بهینهی نسبت ۵/۵ (کمینه منحنی انرژی بر حسب در مشابتدا مقدار بهینهی نسبت ۵/۵ (کمینه منحنی انرژی بر حسب در این مقدار بهینه، کمینه منحنی انرژی بر حسب حجم ساختار محاسبه میشود. شکل (۲) منحنی انرژی بر حسب حجم ترکیب Sr2RuO4 را که با معادله حالت مورناگان برازش داده شده است را نشان میدهد. مشاهده میشود منحنی انرژی کل بر حسب حجم دارای کمینه که به معنی مثبت بودن مدول حجمی و پایدار بودن ساختار در تغییر شکل همگن



شكل ۱ : ياخته واحد تركيب Sr<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub>

است. انرژی لازم برای تشکیل یک بلور از اتمهای آزاد را انرژی تشکیل مینامند که از رابطهی زیر بدست میآید:

$$E_{coh} = \frac{1}{N} \left( E_{solid} - \sum_{A} E_{A}^{isolated} \right) \tag{1}$$

در این رابطه  $E_{coh}$  بیانگر انرژی تشکیل،  $E_{solid}$  انرژی یک سیستم بلوری و  $E_A^{isolated}$  انرژی اتمهای تشکیل دهنده ی بلور در حالت آزاد و N تعداد اتمها است. این کمیت به نوعی معرف پایداری سیستم است و اعتبار نتیجه ی بدست آمده از آن از نتیجه ی نمودار E-V بیشتر است. در هنگام استفاده از تابعی تبادلی همبستگی، هر چقدر مقدار بدست آمده از انرژی تشکیل مقدار کمتری باشد اعتبار نتایج بیشتر و دلیلی بر پایدار بودن بیشتر سیستم است. همانطور که در جدول (۱) مشاهده می شود در این ترکیب به علت عدم همخوانی مقدار محاسباتی با تجربی، تقریب LSDA کارایی مناسبی در محاسبه ی انرژی تشکیل سیستم ندارد . با استفاده از معادله حالت مورناگان ثابت شبکه، مدول حجمی و مشتق مدول حجمی که معیاری از سختی بلور است محاسبه و در جدول (۱) گزارش شده است که نتایج در توافق خوبی با نتایج تجربی موجود می باشد.



انر ژی

تشكيل (Ry/atom)

-۲

-..0171

[^]

:	
21	
	المهيب
6	+ 1777

جدول۱ : خواص ساختاری ترکیب Sr <sub>2</sub> RuO4			
تتراگونال		ساختار	
I4/r	nmm	گروه فضایی	
تجربى	مطالعه حاضر		
a=b=٣.٨٦٢	a=b=۳.٨٠٢٥	پارامتر	
=17.77[7]	C=17.077	شبكه(أنگستروم)	
٤٢-١٤٩ [٨]	171.9404	مدول	
		حجمی(Gpa)	
-	۴.۳۳۵۹	مشتق مدول حجمي	
		B'(p)	
۲۳۵۷.۵۳۸۲[۸]	-77804 998494	انرژی تعادلی	

-...090

مقادیر کلی و جزیی گشتاور مغناطیسی ساختار در جدول (۲) گزارش شده است. با توجه به مقادیر به دست آمده مشاهده می شود که ترکیب به علت تقریبا صفر بودن مقدار گشتاور مغناطیسی کل فاقد خاصیت مغناطیسی می باشد که این در تضاد با مغناطیسی بودن حالت پایه ترکیب است [۹] و نشان می دهد که تقریب LSDA در محاسبه خواص مغناطیسی این ترکیب کارایی لازم را ندارد از طرفی وارد کردن اثر جفت شده گی اسپین-مدار باعث ایجاد تغییرات قابل ملاحظه ای در مقادیر کلی و جزیی گشتاور مغناطیسی شده که این امر به علت لحاظ نشدن اثرات همبستگی در تقریب LSDA می-یاشد.

جدول۲ : مقادیر کلی و جزیی گشتاور مغناطیسی ترکیب Sr<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub>

تجربى	مطالعه ی حاضر		
	بدون اسپين	با اسپین مدار	
	مدار		
١.٦[٩]	•.17789	•.•١٤٤١	Total
	-•.••V٦	-•.••17	Sr
	•.1•172	•.••٧٦٦	Ru
	•.••٢٤•	۰.۰۰۰٤٨	0 (محوري)
	•.• 7207	•.••٢٥١	0 (صفحه ای)

## خواص ساختاري

ویژگیهای الکترونی ترکیبات با استفاده از ساختار نواری و منحنی چگالی حالات الکترونی قابل بررسی است. ویژگیهای مهمی چون گاف انرژی، توزیع ترازهای الکترونی و روش هیبریداسیون اوربیتالهای الکترونی را می توان از این نمودارها بهدست آورد. در شکل (۳) ساختار نواری و چگالی حالات کلی و در شکل (٤) چگالی حالات جزیی ترکیب بر حسب انرژی در حضور و غیاب اثر جفت شدگی اسپین مدار نشان داده شده است. انرژی تراز فرمی با استفاده از خط چین روی نمودار مشخص شده است. نتایج نشان می دهد که ترکیب مورد مطالعه به علت غیر صفر بودن چگالی حالات در سطح فرمی(صفر بودن گاف انرژی) دارای خاصیت فلزی میباشد. علاوه بر این هر دو جهت گیری اسپینی بالا و پایین تقریبا مشابه که نشانهی دیگری از غیرمغناطیسی بودن این ترکیب در حالت پایه در تقریب LSDA می باشد. منحنی چگالی حالات الکترونی جزیی نشان میدهد که بیشترین سهم اوربیتالها در نزدیکی سطح فرمی مربوط به اوربیتال های dxy اتم Ru و اوربیتالهای 2p اتم اكسيژن صفحهاي مي باشد.



شــکل۳ : ساختار نواری اسپین up و down و چگالی حالات کلی ترکیب Sr2RuO4 در حضــور و غیاب جفت شـــدگی اسپین-مدار.



مرجعها

دارد. با وجود شواهد موجود مبنی بر مغناطیسی بودن حالت پایه ساختار، صفر بدست آوردن گشتاور مغناطیسی کل ترکیب و رفتار یکسان ساختار نواری در جهتگیری های اسپین بالا و پایین با بکارگیری تقریب LSDA حاکی از غیر مغناطیسی بودن این ترکیب در حالت پایه است که در تناقض با نتایج تجربی گزارش شده می-باشد. از طرفی محاسبهی انرژی تشکیل ترکیب و عدم همخوانی آن با مقدار گزارش شده دلیلی دیگر بر عدم کارایی مناسب تقریب ما مقدار گزارش شده دلیلی دیگر بر عدم کارایی مناسب تقریب مطلب است که ما برای بدست آوردن نتایجی بهتر و سازگار با نتایج GGA-PBe و GGA-PBe و GGA-PBe و mbj در mbj

[1] S. Benhabib, *et al.*; "Publisher Correction:Ultrasound evidence for a two-component superconducting order parameter in Sr<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub>"; *Nature physics* **17**, (2021) 143.

[Y] A. Chronister, *et al.*; "Pronounced drop of NMR Knight shift in superconducting state of  $Sr_2RuO_4$ "; *arXiv preprintarXiv* 2111-05570 (2021).

[ $\Upsilon$ ] R. Fittipaldi, *et al.*; "Unveiling unconventional magnetism at the surface of Sr<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub>"; *Nature communications* **12**, (2021) 1.

[\*] V. Grinenko, *et al.*; "Split superconducting and time-reversal symmetrybreaking transitions in  $Sr_2RuO_4$  under stress"; *Nature Physics* **17** (2021) 748.

[4] P. Blaha, etal., "WIEN2K, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program For Calculating Crystal Properties"; wien2k\_12.1 (Release 27.02.2012).

[<sup>7</sup>] A. H. Reshak and M. Jamal; "Calculation of the lattice constant of hexagonal compounds with two dimensional search of equation of state and with semilocal functionals a new package (*2D-optimize*)"; *Journal of Alloys and Compounds* **555**, (2013) 362 -366.

[Y]O. Chmaissem, *etal.*; "Thermal expansion and compressibility of Sr<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub>"; *PRB* 57, No 9 (1998) 5067-5070.

[<sup>A</sup>] M. Ziati and H. Ez-Zahraouy; "Effect of uniaxial strain on structural, electronic and optical properties of Sr<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub>: A DFT study"; *Chemical Physics* **544**, (2021) 111132.

[ $^{1}$ ] I. Eremin, *etal.*; "Unconventional superconductivity and magnetism in Sr<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub> and related materials" *Annalen der Physik* **13**, (2004) 149.



شکل ٤ : چگالی حالات جزیی بالا و پایین ترکیب Sr2RuO4 در حضور و غیاب برهمکنش اسیین-مدار.

## نتيجه گيري

در این مطالعه خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی ترکیب Sr2RuO4 در چارچوب نظریه تابعی چگالی با و بدون در نظر گرفتن اثر جفت شدگی اسپین-مدار به صورت اسپینقطبیده با استفاده از تقریب LSDA برای انرژی تبادلی همبستگی مورد بررسی قرار گرفت و نتایج با نتایج تجربی موجود مقایسه گردید. نتایج حاکی از آن است ترکیب Sr2RuO4 به علت دارا بودن چگالی حالات الکترونی غیر صفر در سطح فرمی(صفر بودن گاف انرژی) یک رسانای فلزی میباشد. منحنی چگالی حالات الکترونی جزیی نشان میدهد که بیشترین سهم اوربیتالها در نزدیکی سطح فرمی مربوط به اوربیتال های dxy اتم ND و اوربیتالهای 2p اتم اکسیژن صفحهای میباشد. در تقریب LSDA به علت در نظر نگرفتن اثرات مهمستگی مشاهده شد که لحاظ کردن اثرات برهمکنش اسپین-مدار تاثیرات قابل توجهی در نتایج حاصل از گشتاور مغناطیسی ترکیب



مقالهنامه شانزدهمین کنفرانس ماده چگال انجمن فیزیک ایران (دانشگاه شهید بهشتی، ۵ و ۶ بهمن ماه ۱۴۰۱)



تعیین گاف انرژی، انرژی اورباخ، ضریب شکست و ثابت دی الکتریک نانوبلورهای ZnSe:Cu

سنتز شده در محیط آبی

مقدسی نژاد، عرفانه؛ سوری، داریوش؛ خضری پور، علیرضا دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک، دانشگاه ملایر، ملایر

چکیدہ

دراین پژوهش، نانوبلورهای نیمرسانای ZnSe خالص و (%5. او 0.75 و ZnSe:Cu(0.1 با استفاده از روش آبی سنتز شدند. دراین روش، برای تهیه منبع یون سلنیوم، سدیم بوروهیدرید(NaBH4) و پودر سلنیوم در آب دیونیزه حل شدند؛ این محلول به منبع یون روی در حضور تیوگلیکولیک اسید(TGA) به منبع یون روی در حضور تیوگلیکولیک اسید(ABH4) و پودر سلنیوم در آب دیونیزه حل شدند؛ این محلول به منبع یون روی در حضور تیوگلیکولیک اسید(ABH4) منبع یون سلنیوم، سدیم بوروهیدرید(NaBH4) و پودر سلنیوم در آب دیونیزه حل شدند؛ این محلول به منبع یون روی در حضور تیوگلیکولیک اسید(ABH عنوان عامل پوششی جهت ممانعت از کلوخهای شدن ذرات) و محلول سلیم هیدروکسید(NaOH به عنوان تنظیم کننده 2011) و اندری شد. نتایج XRD عنوان عامل پوششی جهت ممانعت از کلوخهای شدن ذرات) و محلول سلیم هیدروکسید(NaOH به عنوان تنظیم کننده 2012) و 7/72 تایج تایج تایج تشکیل نانوذرات را با اندازه در حدود مصر 1/4 نشان می دهد. با توجه به تحلیل طیف فرابنغش – مرئی، گاف انرژی نانوذرات در گستره که تره تایم کننده و 7/72 تایج تایج تایج ترکی نانوذرات را با اندازه در حدود مصر محلول معنین می دهد. با توجه به تحلیل طیف فرابنغش – مرئی، گاف انرژی نانوذرات در گستره که تره و 7/72 تاین تاید ترکی نانوذرات در گستره معتور نام در گستره و تا افزایش درصد ناخالصی مس می باشد. با روش مشتق انطباق طیف جذبی مقدار دقیق گاف انرژی نانوذرات تعیین شد. اهداف دیگر این پژوهش به دست آوردن شاخص گذار نوری (m)، انرژی اورباخ (Etai)، ثابت دی الکتریک (ع)، و ضریب شکست (n). در لبه جذب می اشد.

Determination of energy gap, Urbach energy, refractive index and dielectric constant for ZnSe:Cu nanocrystals (NCs) synthesized in aqueous media

#### Moghaddasi nezhad, Erfaneh; Souri, Dariush; Khezripour, Alireza

Faculty of Science, Department of Physics, Malayer University, Malayer

#### Abstract

In this research, ZnSe pure and ZnSe:Cu(0.1, 0.75, 1.5%) nanocrystals (NCs) were synthesized in aqueous medium. In this method, to prepare selenium ions source, sodium borohydride (NaBH<sub>4</sub>) and selenium powder were dissolved in deionized water; this solution was injected to Zn ion source at the presence of tioglycolic acid (TGA: as capping agent to prevent agglomeration of the particles) and solution of sodium hydroxide (NaOH: as the pH=11.2). XRD results confirm the formation of nanoparticles owing the size of about 1.5-1.94 nm. According to the UV - Visible analysis, band gap of the nanoparticles was determined and was in the range of 3.342-3.615 eV depending on the Cu dopant showing the decreasing trend of energy gap with increasing impurity. The exact amount of the energy gap of the nanoparticles was estimated by using derivation of absorption spectrum fitting (DASF) method. Other purposes of this study are gaining, optical transition index (m), Urbach energy (E<sub>tail</sub>), dielectric constant ( $\varepsilon$ ), and the refractive index (n) at the absorption edge.

ترکیبات مختلف روی، به دلیل عدم سمیت و قابلیت استفاده در محیطهای زنده، مورد توجه بوده و بارها به روشهای مختلف در مقیاس نانومتری ساخته شدهاند. سلنیدروی به عنوان یک ماده نیمرسانا، مزایای نوری فراوانی داشته و دارای گاف انرژی پهن و مستقیم ۲/۷۲ الکترونولت در حالت تودهای میباشد [٦] . تعیین اندازه نانو ذرات و ویژگیهای شبکهای آنها در تعیین ماهیت

مقدمه

نانوذرات نیمرسانا در حال حاضر در بسیاری از پژوهشها مورد بررسی قرار می گیرند. از میان این نانوذرات، عناصر گروههای III-V،II-VI و IV-VI بسیار مورد توجه پژوهشگران واقع شدهاند و گزارشهای زیادی در معرفی خواص نوری، ساختاری و کاربردهای ترکیبات این عناصر منتشر شده است [۵–۱]. از طرفی،



نیمرسانایی یک ماده و خواص نوری آن نقش مهمی دارد که برای اندازه گیری آنها، روشهای مختلفی ارایه شده است. در این کار، از روش آبی برای تولید نانوذرات سلنیدروی خالص و آلاییده به یونهای ناخالصی مس استفاده شده است و سپس تاثیر ناخالصی مس روی خواص نوری، ویژگیهای ساختاری و عملکرد این نانوذرات بررسی شده است.

## روش آزمایشگاهی

جهت سنتز نانوبلورهای ZnSe:Cu، پودرهای سلنیوم (Se)، سدیم بوروهیدرید (NaBH4)، استات روی (Zn(Ac))، سدیم هیدروکسید (NaOH)، سولفات مس و تیوگلیکولیک اسید (TGA) مورد استفاده قرار گرفته اند. جزئیات دقیق مراحل سنتز در مرجع شماره [۷] ذکر شده است.

جهت تهیه نانو ذرات سلنیدروی آلاییده به یونهای ناخالصی مس ، سولفات مس با درصدهای مشخص به طور همزمان به محلول استات روی اضافه و پس از افزودن TGA، از مقدار مناسب NaOH جهت تنظیم pH نمونهها در مقدار ثابت ۱۱/۲ استفاده شده است و در نهایت محلول سدیم هیدروسلنید به آهستگی به محلول حاوی یونهای ناخالصی تزریق شد. در ادامه فرآیند سنتز به محلول نهایی سانتریفیوژ شده و از نمونههای پودری جهت بررسی خواص ساختاری XRD و از طیف سنجی فرابنفش مرئی -UV) نعواص ساختاری VRD و از طیف سنجی فرابنفش حرئی -UV) سنتز شده استفاده شد.

# نتايج و بحث : آناليز XRD

شکل ۱ الگوی پراش پرتو ایکس نانوذرات ZnSe:Cu را در درصدهای مولی مختلف ناخالصی نشان می دهد. مکان سه قله مهم مشاهده شده در زوایای ۲۵ در این الگو به ترتیب منطبق بر صفحات (۱۱۱) و (۲۲۰) و (۳۱۱) است که با استاندارد (-So. O5) No. JCPDS مطابقت داشته و نشان دهنده ساختار fcc برای این نانوبلورها می باشد. همان طور که مشاهده می شود، مکان بیشینه ها در این الگو با افزایش درصد ناخالصی، بدون تغییر مانده و جابه جایی قابل ملاحظه ای در قلههای الگوی پراش نمونه ها مشاهده نمی شود. بر

این اساس می توان نتیجه گرفت که تغییرات حاصل تاثیری بر ساختار

بلوری نانوذرات سلنیدروی نخواهد داشت.



شكل ۱ : الگوى پراش پرتو ايكس نانوذرات (% ZnSe:Cu (0, 0.1, 0.75, 1.5

تحليل طيف سنجى UV-Visible

شکل ۲ طیف های جذب مربوط به نانوذرات سلنیدروی را با درصدهای مختلف ناخالصی نشان میدهد.



شکل۲: طیف جذب نوری ناحیه فرابنفش-مرئی نانوذرات سلنیدروی در درصدهای مختلف ناخالصی.

در کار حاضراز روش DASF [۸] به عنوان روشی دقیق و کارآمد برای یافتن گاف انرژی و نوع گذار نوری مواد نیمرسانا بهره گرفته شده است. طبق این روش،نمودار ۱/λ-1/λ (شکل ۳) در 1/ دارای یک ناپیوستگی خواهد بود که با تعیین آن، مقدار طول موج گاف انرژی با دقت تعیین خواهد شد و بدین ترتیب گاف انرژی بدست می آید.

$$E_g^{DASF}(eV) = \frac{hc}{\lambda_g} = \frac{1239.83}{\lambda_g} \tag{(1)}$$



با توجه به تحلیل طیف فرابنفش – مرئی، گاف انرژی نانوذرات بسته به مقدار ناخالصی مس تعیین شد که نتایج در گسترهی ۱۳/۳۵–۲۹۳۲ الکترون ولت بود. نتایج نشان دهندهی کاهش گاف انرژی با افزایش درصد ناخالصی مس می باشد. تفاوت مشهود در نمونهی دارای ۱/۵ درصد ناخالصی مس (در شکل ۳) مربوط به انتقال لبهی جذب به سمت قرمز و البته ساختار نواری انرژی متفاوت این نمونه در قیاس با دیگر نمونه هاست که در تشریح نتایج حاصل از شکل ٤ به آن پرداخته خواهد شد.



شکل۳: نمودار DASF نانوذرات سلنیدروی در درصدهای مختلف ناخالصی.

براساس روش DASF و با رسم نمودار  $\left(\frac{A}{\lambda}\right)$  البرحسب براساس روش DASF و با رسم نمودار  $\left(\frac{A}{\lambda}\right)$  ال برحسب  $\left(\frac{1}{\lambda}-\frac{1}{\lambda_g}\right)$  ، مقدار m و در نتیجه تشخیص نوع گذار مستقیم نوری صورت گرفته را در کار حاضرامکان پذیر می سازد (شکل ٤). مقادیر بدست آمده برای شاخص m (بجز نمونه حاوی ١/٥ درصد مس) پیرامون ٥/٠ بوده و موید ماهیت گاف مستقیم و گذار مستقیم مجاز حاملهای بار می باشد؛ در نمونه حاوی ١/٥ درصد مس، شاخص گذار نوری حاملهای بار به سمت عدد ۳ تمایل دارد که مبین تغییر ساختار نواری انرژی بسمت گاف غیر مستقیم می باشد (جدول ۱). نتایج انرژی اورباخ در شکل ٥ و جدول ۱ نیز موید بی نظمی ساختاری اندکی بیشتر در همین نمونه در مقایسه با دیگر

انرژی اورباخ معیاری از بینظمی اتمی و انحراف از وجود لبههای تیز نوارهای ظرفیت و رسانش میباشد. طبق آنچه در شکل ۵ آمده است، میتوان از قرار دادن شیب ناحیه خطی نمودار (ln(A) برحسب <sup>1-</sup>λ در رابطه ۲، انرژی اورباخ را برای نمونههای سنتز شده محاسبه نمود [٦] .

 $E_{tail}(eV) = 1239.83/slope \tag{(r)}$ 

ضریب شکست و ثابت دی الکتریک نمونه ها در لبه جذب، با استفاده از دادههای گاف نوری و از روابط ۳ و ٤ حاصل می شود[٦] .

$$n = \left( \left( 6\sqrt{\frac{5}{E_g}} \right) - 2 \right)^{1/2} \tag{(r)}$$
$$\varepsilon = n^2 \tag{(s)}$$

نتایج مربوط به ضریب شکست و ثابت دی الکتریک نمونه ها نشاندهندهی رابط ه معکوس و البت ه منطقی بین گاف انرژی و یارامترهای مذکور می باشد.



شكل٤: نمودار Ln(A/λ)-Ln(1/λ-1/λg) نانوذرات سلنيدروي هم آلاييده.



شکل ٥: نمودار اورباخ نانوذرات سلنیدروی در درصدهای مختلف ناخالصی.

نتایج مربوط به مقادیر گاف انرژی، شاخص گذار نوری حاملهای بار، انرژی اورباخ و ثوابت نوری n وع در جدول ۱ آمده است.





quantum dots fabricated by rapid microwave activated method"; *Optik* **183** (2019) 294-301.

- [4] Al Abass, N.; Qahtan, T.F.; Gondal, M.A.; Moqbel, R.A.; Bubshait, A. Laser-assisted synthesis of ZnO/ZnSe hybrid nanostructured films for enhanced solar-light induced water splitting and water decontamination. Int. J. Hydrogen Energy 45 (2020) 22938–22949.
- [5] K. Yadav, Y. Dwivedi, and N. Jaggi; "Structural and optical properties of Ni doped ZnSe nanoparticles"; *Journal of Luminescence* **158** (2015) 181-187.
- [6] D. Souri, M. Sarfehjou and A. R. Khezripour; "The effect of ambient temperature on the optical properties and crystalline quality of ZnSe and ZnSe: Cu NCs grown by rapid microwave irradiation"; *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* 29(4) (2018) 3411-3422.
- [7] M. G. Hajiabadi, M. Zamanian and D. Souri; "Williamson-Hall analysis in evaluation of lattice strain and the density of lattice dislocation for nanometer scaled ZnSe and ZnSe:Cu particles"; *Ceramics International* 45(11) (2019) 14084-14089.
- [8] D. Souri and Z. E. Tahan; "A new method for the determination of optical band gap and the nature of optical transitions in semiconductors" ; *Applied Physics B* 119, no. 2 (2015) 273-279.

جدول ۱: نتایج خواص نوری نانوذرات سنتزشده در در محیط آبی در pH=11.2

Sample	ZnSe pure	ZnSe:Cu(0.1%)	ZnSe:Cu(0.75%)	ZnSe:Cu(1.5%)
λ <sup>-1</sup> g (nm <sup>-1</sup> )	0.002917	0.002906	0.002883	0.002696
Egap <sup>DASF</sup> (eV)	3.615	3.602	3.574	3.342
Value of m	0.713	0.760	0.819	2.39
E <sub>tail</sub> (eV)	0.076	0.072	0.091	0.094
n	2.248	2.251	2.257	2.310
3	5.056	5.069	5.096	5.338
Size (nm)	1.59	1.73	1.78	1.93

## نتيجه گيري

این نانوذرات دارای ماهیت گاف مستقیم هستند. گاف انرژی نانوذرات درگسترهی*۲۷۵ ۲۳۵ ۲۳۵ ۲۳*۲۰ بدست آمد که از مقدار آن در حالت تودهای(۲/۷ eV) بیشتر بوده و موید تشکیل نانوذرات با ابعاد نانومتری است. افزایش ناخالصی Cu منجر به کاهش گاف انرژی و افزایش اندازه نانوذرات شده است همچنین مقادیر کمتر انرژی اورباخ نشان دهتده ی کیفیت بلوری بالاتر نمونه می باشد. بر این اساس نمونه (0.1%) ZnSe:Cu به لحاظ ساختاری , نمونه بهینه و دارای بیشترین کیفیت بلوری محسوب می گردد.

مرجعها

- [1]Tran Thi Kim Chi, Bui Thi Thu Hien, Man Hoai Nam, and Pham Nguyen Hai; "Structural and Optical Properties of ZnSe Nanoparticles"; Journal of Nanoscience and Nanotechnology 21(4)(2021)2582–2587.
- [2] D. Souri, K. Ahmadian and A. R. Khezripour; "Optical properties of ZnSe nanocrystals (NCs) prepared by microwave irradiation method at different pH and different irradiation times"; *Journal of Electronic Materials* **47**(11) (2018) 6759-6766.
- [3] A. R. Khezripour and D. Souri; "PH- microwave irradiation time-, and dopant content-sensitive photoluminescence of pure and Cu-doped ZnSe

# آیا پوشش کرونا ویروسها با بالا رفتن دما از هم می پاشد؟

نیکوفرد، نرگس'، احمدی، حامد

<sup>ا</sup> پژوهشکارهی علوم و فن آوری نانو، دانشگاه کاشان، کیلومتر**آ** بلوار قطب راوناری، کاشان

ادانشکادهی فیزیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، خیابان دانشگاه، خیابان هنگام، تهران

چکیدہ

کرونا ویروس ها از جمله کووید-۱۹ و آنفولانزا دارای یک پوشش لیپیدی هستند. این پوشش لیپیدی نقش اساسی در بیماری زایی ویروس دارد ولی بسیار حساس به گرما نیز هست. سوال این است که آیا این پوشش لیپیدی در دمای بالا به طور کلی از هم می پاشد؟ ما کلیه ی انرژی های مساله را بررسی کرده و نشان می دهیم که انرژی آبگریزی تنها عاملی است که در پایداری پوشش لیپیدی اهمیت دارد. به علاوه، نشان می دهیم این انرژی آنقدر قدرتمند است که اجازه نمی دهد کل پوشش لیپیدی – حتی در دمای بالا – از هم بپاشد. نتیجه نهایی این است که واپاشی پوشش ویروس با ایجاد پارگی در پوشش است و نه از هم پاشیده شدن کل آن. واژه های کلیدی: کووید-۱۹، پوشش لیپیدی، آبگریزی

## Does the coating of corona viruses disintegrate as the temperature rises?

#### Narges Nikoofard<sup>a</sup>, Hamed Ahmadi<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Institute of Nano-science and Nano-technology, University of Kashan, Kashan, 51167-87317, Iran

<sup>b</sup>Faculty of Physics, Iran University of Science and Technology, Tehran, Hengam St., University St., Iran

#### Abstract

Corona viruses, including Covid-19 and influenza, have a lipid coating. This lipid coating plays an essential role in the virulence of the virus, but it is also very sensitive to heat. The question is, does this lipid coating completely disintegrate at high temperatures? We have examined all the energies of the problem and show that the hydrophobic energy is the only factor that is important in the stability of the lipid coating. Furthermore, we show that this energy is so powerful that it does not allow the entire lipid coating to disintegrate, even at high temperatures. The end result is that the disintegration of the virus envelope is by creating a tear in the envelope and not the entire disintegration.

Keywords: Covid-19, lipid coating, hydrophobicity

PACS No. 62, 65, 87



#### مقدمه

کرونا ویروس ها شامل دسته بزرگی از ویروس ها هستند که ویروس های معروفی همچون ایدز، آنفولانزا و کووید-۱۹ را شامل می شود. این ویروس ها حاوی یک پوشش لیپیدی هستند که کل ویروس از جمله ژنوم آنها را احاطه کرده است. پروتئین هایی که موجب ورود ویروس به سلول میزبان می شوند بر روی این پوشش لیپیدی قرار دارند. بدون این پوشش لیپیدی، ویروس قابلیت حمله و ورود به سلول های میزبان را ندارد. در نتیجه نمی تواند ژنوم خود را تکثیر کرده و فاقد بیماری زایی است.

غشای دولایه لیپیدی یک ساختار شناخته شده در مواد نرم است که بر اثر خودتجمعی دمهای آبگریز لیپیدها تشکیل می شود. از آنجا که این ساختار بر اثر برهمکنشهای آبگریزی ساخته شده است، در برابر افزایش دما حساس و آسیبپذیر است. مطالعات متعددی در زمینه ایجاد حفره در غشای لیپیدی در اثر اعمال تنش و عوامل دیگری مانند تابش نور یا برهمکنش با نانوذرات یا مواد زیستی خاص برای ایجاد حفره در غشا انجام شده است [۸–۱]. میزان پایداری کووید–۱۹ در برابر گرما از مسایل اساسی است که از ابتدای محافظت فردی از جمله پوشیدن ماسک اهمیت دارد. به علاوه، در روشهای ویروس زدایی بر اساس گرما نیز حائز اهمیت. در اینجا، بررسی میزان پایداری غشای دولایه لیپیدی از جنبه فیزیکی و انرژیهای سیستم مورد نظر هست. از این جهت، انرژی آزاد

نظریه: انرژی آزاد کل سیستم – شامل ویروس ها و آب – از رابطه زیر بدست می آیاد [۹]: (۱)  $F_{sph} = -(N_{out} + N_{in})E_s + F_{c-in} + F_{c-out} + k_BTX_1 lnX_1 + k_BTX_{Nsph} lnX_{Nsph} + k_BT \left(1 - (X_1 + X_{Nsph})\right) ln \left(1 - (X_1 + X_{Nsph})\right) + F_{E1} + k_{E1} + k_{$ 

جمله اول انرژی آبگریزی، جمله دوم و سوم انرژی خمش دو پوسته کروی، جمله چهارم انرژی مربوط به آنتروپی مولکولهای منفرد در محلول، جمله پنجم انرژی مربوط به آنتروپی ویروسها، جمله ششم انرژی مربوط به آنتروپی مولکولهای آب، جمله هفتم انرژی الکترواستاتیک مربوط به ساختار مولکولی در محلول الکترولیت و جمله هشتم انرژی الکترواستاتیک مربوط به قرار گرفتن یک پوسته در پتانسیل پوسته دیگر میباشد.

انرژیهای خمش کل دو پوسته کروی از رابطه زیر بدست میآیند:

 $F_c = \int \frac{K}{2} (c_1 + c_2 - 2c_0) dA = KcA$  (۲ در رابطه بالا، خمش ذاتی غشای دولایه صفر فرض شده است. K مدول خمشی است.  $c_1$  و  $c_2$  انحنا در دو راستا هستند که برای یک پوسته کروی در دو جهت یکسان و برابر با معکوس شعاع میشوند. A مساحت کل پوسته است.

برای انرژی الکتروستاتیک از رابطه زیر استفاده شده است

 $\frac{F_e(\sigma)}{k_B T} = \sigma \Psi_0 - \frac{\kappa}{\pi l_B} \left[ \cosh\left(\frac{\Psi_0}{2}\right) - 1 \right] \quad (\mathfrak{r}$   $\Psi_0$   $\Psi_$ 

 $\Psi_0 = 2\sinh^{-1}\left(\frac{2\pi\sigma l_B}{\kappa}\right) \tag{2}$ 

 $l_B$  چگالی سطحی بار ناشی از سر آبدوست لیپیدهاست.  $\kappa^{-1}$  و  $\kappa^{-1}$  ج  $\kappa^{-1}$  په ترتیب طول دبای و طول بیرم هستند که با روابط  $\kappa^{-1}$  به ترتیب طول دبای و طول بیرم هستند که با روابط  $n_0$  به ترتیب  $n_0$  و  $l_B = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r k_B T}$  داده می شوند. در اینجا  $n_0$  چگالی تعداد کل یونهای نمک تک ظرفیتی در حلال،  $\epsilon_0$  گذردهی خلاء و  $\epsilon_r$  گذردهی نسبی حلال است [۱۰].

نتايج:

انرژی آبگریزی برای لیپید فسفوگلایسرول در دمای ٤٠ درجه سانتیگراد برابر منفی ٤.٧٥ کیلوژول بر مول است [۱۱]. این مقدار را میتوان با تقسیم کردن بر  $k_B T = 4.14 \times 10^{-24} KJ$  و ضرب کردن در تعداد ذرات در یک مول  $10^{23} \times 6.02 \times 6.02$  در واحد انرژی گرمایی به ازای هر لیپید نوشت،  $E_s = -1.90 \frac{k_B T}{lipid}$  در اینجا، کلیه سهمهای انرژی در همین واحد محاسبه می شوند.

 $F_{E2}$ 

در روابط انرژی خمشی، ثابت خمشی K برای لیپید POPC برابر ۲٤.۳ برابر انرژی گرمایی گزارش شده است [۱۲]. ثابت خمشی برای لیپیدهای دیگری که در مرجع اخیر مطالعه شدهاند در محدوده ۱۵ تا ٤٠ برابر انرژی گرمایی قرار دارد. در صورتی که کلسترول در ساختار لیپید وجود داشته باشد، ثابت خمشی تا ۱۳۰ برابر انرژی گرمایی قابل افزایش است. در روابط بالا، انرژی خمشی بر واحد سطح داده شده است. برای اینکه انرژی خمشی را بر واحد لیپید بنویسیم، باید تعداد لیپیدها بر واحد سطح را بدانیم. مساحت متوسط به ازای هر لیپید برای انواع لیپیدها در محدوده ۲۰ آنگستروم به توان دو قرار دارد [۳۳]. این مساحت در صورت افزوده شدن انرژی خمشی به ازای هر لیپید از مرتبه ۱۰ به توان منفی ۱۲ می شود که عدد بسیار کوچکی است.

در سه جمله مربوط به آنتروپی، دو پارامتر  $X_{Nsph}$  و  $X_{1}$  به ترتیب نسبت حجمی ویروسها و لیپیدهای منفرد (که جدا از ویروسها هستند) در قطرات تنفسی فرد بیمار است. هنگامی که پوشش لیپیدی یک ویروس از هم میپاشد، لیپیدهای سازنده آن به صورت منفرد در محلول رها میشوند. فرض میشود که در ابتدای رهایش قطرات تنفسی، هیچ لیپید منفردی در آن وجود ندارد. غلظت اولیه ویروسها در قطرات مخاطی برابر 2001 =  $X_{Nspher}$  است [18].

 $N_{spher}$  تا المعارف محمد المحمد المحم المحمد المحم المحم

ولی این افزایش به اندازهای نیست که این اختلاف زیاد را جبران بکند.

در جملات مربوط به انرژی الکتروستاتیک، ضریب دیالکتریک آب برابر ۸۰ استفاده شده است. چگالی تعداد کل یونهای نمک تکظرفیتی در حلال برابر ۱٤۰ میلیمولار [۱۲] گرفته شده و از آن طول دبای محاسبه شده است. چگالی بار بر واحد سطح غشا با در نظر گرفتن یک بار منفی برای هر لیپید محاسبه شده است.

## نتيجه گيري

نتیجه محاسبات ما (منطبق با نتایج قبلی [۱۱]) نشان میدهد که انرژی آبگریزی نقش اصلی در انرژی آزاد دارد و سایر جملات (از جمله خمش، آنتروپی و الکتروستاتیک) قابل صرفنظر کردن هستند. انرژی واپاشی یک وزیکول به ازای هر لیپید برای پلی گلایسرول در دمای ٤٠ درجه سانتیگراد برابر ٤٤.۷ کیلوژول بر مول [۱۱] یا ۲.۹۸ برابر انرژی گرمایی به ازای هر لیپید است. یک ویروس کووید–۱۹ تقریبا دارای ۲۰۰۰ لیپید سازنده است. در نتیجه هزینه انرژی آبگریزی کل در واپاشی یک ویروس از مرتبه ۲۰ هزار برابر انرژی گرمایی می شود. بنابراین احتمال واپاشی کل ویروس در دمای ۶۰ درجه سانتیگراد صفر است.

انرژی آبگریزی با دما رابطه خطی دارد و برای لیپید پلی گلایسرول در دو دمای ٤٠ و ٥٠ درجه سانتیگراد گزارش شده است [١١]. با برازش خطی می توان مقدار انرژی آبگریزی را در دمای ٨٠ درجه سانتیگراد برونیابی کرد. انرژی آبگریزی در دمای ٥٠ درجه سانتیگراد برابر ٢٠٠٥ کیلوژول بر مول یا ١٩٠٠ برابر انرژی گرمایی به ازای هر لیپید بدست می آید. در نتیجه انرژی واپاشی کل یک ویروس کووید-۹۱ در حدود ١٤ هزار برابر انرژی گرمایی می شود. بنابراین در دماهای بالای معمول نیز احتمال واپاشی کل پوشش ویروسی، ایجاد جفره در غشا عامل نابودی ویروس می شود. ایجاد حفره یا چند تکه شدن غشای لیپیدی در دماهای فوق بالا یا با استفاده از تابش نور لیزر- به جای واپاشی کل غشا-در کارهای گذشته دیده شده است چند تکه شدن پوشش افزایش بدهد تا همچنان لیپیدها در مجاورت [16] Malik, V. K., Shin, S., & Feng, J. (2020). Light-triggered explosion of lipid vesicles. *Soft Matter*, **16(38)**, 8904-8911.

یکدیگر باقی مانده و از مجاورت با محیط نامطلوب آبی مصون بمانند. انتظار میرود که چند تکه شدن پوشش از ایجاد یک حفره آغاز شود، بنابراین در ادامه به انرژی آزاد ایجاد حفره پرداخته میشود. در کارهای قبلی، نشان داده شده است که حفره درون یک پوشش لیپیدی می تواند ناپایدار بوده و بسته شود یا برعکس با گذشت زمان گسترش یافته و منجر به پارگی کل پوشش شود.

مرجعها

[1] Sarkar, M. K., Karal, M. A. S., Ahmed, M., Ahamed, M. K., Ahammed, S., Sharmin, S., & Shibly, S. U. A. (2021). Effects of osmotic pressure on the irreversible electroporation in giant lipid vesicles. *Plos one*, **16(5)**, e0251690.

[2] Morita, M., & Noda, N. (2021). Membrane Shape DynamicsBased Analysis of the Physical Properties of Giant Unilamellar Vesicles Prepared by Inverted Emulsion and Hydration Techniques. *Langmuir*, **37(7)**, 2268-2275.

[3] Cunill-Semanat, E., & Salgado, J. (2019). Spontaneous and stressinduced pore formation in membranes: theory, experiments and simulations. *The Journal of membrane biology*, **252(4)**, 241-260.

[4] Karal, M. A. S., Ahamed, M. K., Orchi, U. S., Towhiduzzaman, M., Ahmed, M., Ahammed, S., ... & Ullah, M. S. (2021). An investigation into the critical tension of electroporation in anionic lipid vesicles. *European Biophysics Journal*, **50**(1), 99-106.

[5] Kumar, V., & Feng, J. (2021). Non-pulsatile lipid vesicles under osmotic stress. *Bulletin of the American Physical Society* 

[6] Zuraw-Weston, S., Wood, D. A., Torres, I. K., Lee, Y., Wang, L. S., Jiang, Z., ... & Dinsmore, A. D. (2019). Nanoparticles binding to lipid membranes: from vesicle-based gels to vesicle tubulation and destruction. *Nanoscale*, **11(39)**, 18464-18474.

[7] Karal, M. A. S., Ahammed, S., Levadny, V., Belaya, M., Ahamed, M. K., Ahmed, M., ... & Ullah, A. A. (2020). Deformation and poration of giant unilamellar vesicles induced by anionic nanoparticles. *Chemistry and physics of lipids*, **230**, 104916.

[8] Kulma, M., & Anderluh, G. (2021). Beyond pore formation: reorganization of the plasma membrane induced by pore-forming proteins. *Cellular and Molecular Life Sciences*, **78(17)**, 6229-6249.

[9] Jones, Richard. (2002). Soft Condensed Matter. *European Journal of Physics*. 23, 652.

[10] Bagheri, A., Taheri-Araghi, S., & Ha, B. Y. (2015). How cell concentrations are implicated in cell selectivity of antimicrobial peptides. *Langmuir*, **31(29)**, 8052-8062.

[11] Marsh, D. (2012). Thermodynamics of phospholipid selfassembly. *Biophysical journal*, **102(5)**, 1079-1087.

[12] Doktorova, M., Harries, D., & Khelashvili, G. (2017). Determination of bending rigidity and tilt modulus of lipid membranes from real-space fluctuation analysis of molecular dynamics simulations. *Physical Chemistry Chemical Physics*, **19(25)**, 16806-16818.

[13] Shahane, G., Ding, W., Palaiokostas, M. et al. (2019). Physical properties of model biological lipid bilayers: insights from all-atom molecular dynamics simulations. *J Mol Model*, **76** 

[14] Netz, R. R. (2020). Mechanisms of airborne infection via evaporating and sedimenting droplets produced by speaking. *The journal of physical chemistry B*, **124(33)**, 7093-7101

[15] Asadi, S., Wexler, A. S., Cappa, C. D., Barreda, S., Bouvier, N. M., & Ristenpart, W. D. (2019). Aerosol emission and superemission during human speech increase with voice loudness. *Scientific reports*, **9(1)**, 1-10.

## تاثیر برهمکنش الکترون -فونون روی ترابرد الکتریکی در نانوساختارهای نامتجانس خلج ، اکبر<sup>۱</sup> ؛ شکری، علی اصغر<sup>۱۷۲</sup> ؛ سلامی، نادیا<sup>۳</sup> <sup>اگروه فیزیک، دانشگاه پیام نور ، ص.ب. ۲۹۲۶-۱۹۳۹، تهران <sup>۲</sup> گروه فیزیک، دانشگاه ایزهرا ، تهران ۲ گروه فیزیک، واحد یاسوج، دانشگاه آزاد اسلامی، یاسوج، ایران</sup>

چکیدہ

در این مقاله، با استفاده از رهیافت تابع گرین رسانش الکتریکی یک نانو سیم کوانتومی را در حضور برهمکنش الکترون –فونون بررسی میکنیم. ساختارمورد مطالعه به صورت شبکه یک بعدی نامتجانس Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/Al<sub>y</sub>Ga<sub>1-y</sub>As فرض می شود که بین دو الکترود فلزی نیم بی نهایت از جنس طلا محدود شده است. با کمک نتایج عددی بدست آمده نمودارهای ضریب عبوردهی الکترونی برحسب تغییرات انرژی و بسامد وادا شته بدون بعد و ضرایب عبور بر حسب انرژی را ابتدا در غیاب بر هم کنش الکترون– فونون و بار دیگر در حضور بر هم کنش الکترونی تر سیم کرده و مورد تجزیه و تحلیل قرار داده ایم. در حضور بر همکنش الکترون – فونون ، برخی از قله های تشدید انرژی در یک بسامد معین به دره تبدیل شده اند ، همچنین با افزایش غلظت Al و افزایش بسامد تشدید ، مقدار ضریب عبور کاهش می یابد.

واژههای کلیدی: بر همکنش الکترون – فونون ، نانو سیم کوانتومی، ضریب عبوردهی، رسانش الکترونی.

# Influence of electron-phonon interaction on the electric transport in a typical heterostructuresied

#### Khalaj, Akbar<sup>1</sup>, Shokri, Aliasghar<sup>1,2</sup>, Salami, Nadia<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Payame Noor University, Tehran <sup>2</sup> Department of nanophysics, Faculty of Physics, Alzahra University, Tehran <sup>3</sup> Department of Physics, Yasuj Branch, Islamic Azad University, Yasuj, Iran

#### Abstract

In this work, using the Green's function approach, we investigate the electrical conductivity of a quantum nanowire in the presence of electron-phonon interaction. The studied structure is a one-dimensional inhomogeneous  $Al_xGa_{1-x}As/Al_yGa_{1-y}As$  which is assumed to be confined between two semi-infinite metal electrodes made of gold. With the help of the obtained numerical results, the graphs of electron transmission coefficient in terms of energy changes and dimensionless forced frequency and transmission coefficients in terms of energy were first drawn in the absence of electron-phonon interaction, some peaks of energy resonance at a certain frequency have turned into valleys, also with increasing Al concentration and increasing resonance frequency, the value of transmission coefficient decreases.

*Keywords*: electron-phonon intraction, quantum nano-wire, transmission coefficient, the electronic conductive. PACS No1935-4697

یکی از مسائل مورد علاقهی محققین در زمینهی بررسی خواص انتقال الکترونی و گرمایی در حضور و غیاب برهمکنش الکترون –

مقدمه

فونون است. نتایج دیگران در مورد ساختارهای مختلف نشان می-دهد که این نوع برهمکنش باعث تغییر خواص الکترونیکی و گرمایی می شود. بنابراین، درک درستی از این موضوع می تواند به ما در طراحی ادوات الکترونیکی کمک کند [۱–۳]. در این کار علاوه بر بررسی اثر جفت شدگی الکترون – فونون، همزمان اثر ناخالصی در نانو ساختارهای ناهمگن بر روی خواص ترابرد الکترونیکی مطالعه شده است.

## توصيف مدل و فرمولبندى آن

ساختار مورد بحث ما یک زنجیره شبه یک بعدی نامتجانس به صورت سیم کوانتومی متشکل از دو بخش مرکزی متصل به هم به صورت Nal<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/Al<sub>y</sub>Ga<sub>1-y</sub>As است. بخش اول دارای به صورت زنجیره N<sub>1</sub> اتم و بخش دوم نیز دارای N<sub>2</sub> اتم است.که به صورت زنجیره شبه یک بعدی متصل به دو الکترود نیمبینهایت از جنس اتمهای طلا در نظر می گیریم.

در یک سیم ملکولی به شکل زنجیره یک بعدی، با اعمال نیروی واداشته خارجی وابسته به زمان (که در اثر وجود میدان الکتریکی خارجی متناوب تولید میشود) اتمها حول موقعیت تعادلی و ترازمندیشان شروع به نوسان میکنند. این موضوع میتواند برهمکنش بین الکترونها با فونونها را به وجود آورد و باعث تغییر انرژی همپوشانی اربیتالهای الکترونی نزدیکترین همسایه میشود. برای مدل کردن اثرات ناشی از فونونها از رهیافت شبهکلاسیکی (سیستم جرم + فنر) به صورت اختلال در هامیلتونی کل سامانه استفاده میکنیم. شبیه این ایده در کارهای دیگران برای سامانههای دیگری نیز آمده است[٤].

هامیلتونی سامانه مورد نظرمطابق رابطه (۱) شامل سه بخش : هامیلتونی الکترود چپ (منبع)،  $H_D$  هامیلتونی الکترود راست  $H_s$ (جمع کننده)و  $H_c$  هامیلتونی بخش مرکزی دستگاه است.  $H_c=H_s+H_{sc_1}+H_{c_1c_2}+H_{c_2}+H_{C_2D}+H_D$  (۱)

در این رابطه H<sub>c1</sub> و H<sub>c2</sub> به ترتیب بیانگر هامیلتونی نواحی مرکزی (پراکندگی) سمت چپ و راست هستند. از طرفی مطابق با رویکرد نزدیکترین همسایه، هامیلتونی الکترود ها و جفتشدگی نواحی مرکزی با الکترود ها از رابطه (۲) بدست می آید.

$$\begin{split} H_{\alpha} &= \sum_{i=1}^{N} \epsilon_{i\alpha} a_{i}^{+} a_{i}^{+} \sum_{i}^{N-1} \left( t_{(i,i-1)_{\alpha}} a_{i}^{+} a_{i-1} + t_{(i,i-1)_{\alpha}}^{+} a_{i-1} a_{i} \right) \ (\Upsilon) \\ & \text{ cr} \ (I_{i,i-1}) \ e \ (I_{i,i-1}) \ e \ (I_{i,i-1}) \ e \ (I_{i,i-1}) \ a_{i-1} a_{i} \right) \ (\Upsilon) \\ & \text{ ind} \ (I_{i,i-1}) \ e \ (I_{i,i-1}) \ e \ (I_{i,i-1}) \ e \ (I_{i,i-1}) \ a_{i-1} a_{i} \right) \ (I_{i,i-1}) \ e \ (I$$

بر ا ساس تقریب هماهنگ در یک زنجیره ی خطی با ثابت شبکهی a نیروی وادا شتهی وارد بر اتم i ام تابعی از مکان و زمان است که به صورت ر*ابطه* (۳) تعریف می شود [٤].

- $\frac{F_{i}(t)}{A} = \frac{1}{\omega_{0}^{2}} \frac{d^{2}u_{i}(t)}{dt^{2}} + B \frac{du_{i}(t)}{dt} + 2u_{i}(t) \cdot (u_{i+1}(t) + u_{i-1}(t))$ (7) c (7) c
  - F<sub>i</sub>(t)=(-1)<sup>i+1</sup>Αδ cos (ωt) بدست می آید [٥].

 $A=ma\omega_0^2 \quad g=2\frac{\gamma}{\omega_0} \quad g=2$  م و  $B=2\frac{\gamma}{\omega_0}$  و  $Z\omega_0$  هدر آن  $\omega$  بسامد میدان خارجی و Z نیز در این رابطه  $\omega=Z\omega_0$  که در آن  $\omega$  بسامد میدان خارجی و Z نیز بسامد حاصل از نیروی وادا شته خارجی و کمیتی بدون بعد است، که آن را اصطلاحاً بسامد تشدید مینامیم. همچنین  $\omega$  یعنی بسامد طبیعی نوسان به طور معمولی در حدود <sup>2-</sup>01 تا <sup>4-</sup>01 است. پارامتر B ثابت شبکه بوده و  $\gamma$  ضریب میرایی نوسان که در محاسبات در حدود <sup>1-</sup>01 تا <sup>2-</sup>01 در نظر گرفتیم. بنابراین با استفاده از تبدیل فوریه در شرایط پایا [7] و با وارد نمودن نیروی استفاده از تبدیل فوریه در شرایط پایا [7] و با وارد نمودن نیروی (٤)  $u_i(t) = \frac{1}{A} Real(\sum_{j=1}^{n} G_{i,j}^{ph} F_j(t) exp(-i\omega t))$ در رابطه (٤)  $G_{i,j}^{ph}$  بیانگر عناصر ماتریس تابع گرین فونونی

زنجیره را نشان می دهد که مطابق رابطه زیرمحاسبه می شود [٥]

$$G_{i,j}^{ph} = \frac{p_{i-1}p_{N-j}}{p_N}, \quad i \le j$$
 (0)

$$p_{i} = \frac{(\sigma + \sqrt{\sigma^{2} - 1})^{-1} - (\sigma - \sqrt{\sigma^{2} - 1})^{-1}}{2\sqrt{\sigma^{2} - 1}}$$
(7)

در اینجا،  $G_W^{-1} - \frac{Z^2}{2} - i\gamma z$ . و تابع وارون گرین  $(G_W^{-1})$  کل سامانه به وسیله رابطه  $\Sigma - \Sigma - \Sigma - S - \Sigma - G_W^{-1}$  داده می شود. که در آن کمیت  $\Sigma - \Sigma - \Sigma - \Sigma - S - \Sigma - G_W^{-1}$  داده می شود. که در آن اکترود سمت را ست متصل به سیم کوانتومی ا ست که با رابطه الکترود سمت را ست متصل به سیم کوانتومی ا ست که با رابطه مرود سمت را ست می می شود. در اینجا،  $\alpha = S$ , D همچنین تابع گرین ایزوله  $(\alpha - 1 + i\eta^{+1} - H_G) = -\alpha$ اس

پس از محاسبهی تابع گرین فونونی با کمک روابط بالا، ضریب عبوردهی الکترونی وابسته به زمان و انرژی به وسیله رابطه T(E,t)=Trac(Γ<sub>S</sub>G<sub>W</sub>Γ<sub>D</sub>G<sup>+</sup><sub>W</sub>) داده می شود. برای از بین بردن وابستگی زمانی در این رابطه، ما از این رابطه انتگرالگیری میکنیم تا مقدار میانگین ضریب عبوردهی سامانه بدست آید.

 $T_{av}(\varepsilon,\omega) = \frac{\omega}{2\pi} \int_{0}^{\frac{2\pi}{\omega}} T(\varepsilon,t) dt$ (9) c list (0,0) (1) c list (0,0) (2) c list (0,0) (2)

## نتایج عددی و توصیف آنها

شـكل ۱ نمودار پربند تغییرات ضـریب عبوردهی الكترونی را برحسب انرژی الكترون فرودی و بسامد تشدید بدون بعد حاصل از ا عمـال ذیروی خـار جی را در نـا نوسـ یم كوا نتو می  $Al_xGa_{1-x}As/Al_yGa_{1-y}As$  در سـه حالت از جفت شـدگی الكترون – فونون نشـان میدهد. رنگها مقادیر عبوردهی را نشـان میدهند كه برای راهنمایی در كنار نمودار آورده شـده اسـت. همچنین مقادیر عددی برخی از كمیتهای ثابت به قرار زیر است .  $B_{S(D)}=\varepsilon_w=0$  و  $0=w^{-2}$ 

در حالت 
$$0 - \lambda$$
 در عیاب برهمخش الخترون – قونون معابی  
شـکل (۱-  $a$ ,  $d$ ,  $z$ ) تغییرات انرژی مستقل از مقدار بسامد  
واداشته بوده و هیچ تغییری در نموارهای انرژی حاصل نشده است.  
شکل (۱-  $b - g - d$ ) تغییرات انرژی بر حسب بسامد واداشته در  
می دهد. در این نمودارها تاثیر جغت شـدگی ضـعیف الکترون –  
فونون روی نانو سـاختار  $A_{x}/As/AlyGa_{x}/As$  ایم مقادیر  
متفاوت  $X \in V$  (بررسـی کردهایم. نتایج نشـان می دهد. که در  
مغاوت  $X = V$  (بررسـی کردهایم. نتایج نشـان می دهد. که در  
مشاهده می شود که با افزایش بسامد جفتشـدگی ضـعیف  
روی می دهد. اما در شکل ( ۱-  $g = d$  و آ) شدت بسامد  
جمتشـدگی الکترون – فونون را به  $A = A$  افزایش دادیم.  
کوچکی روی می دهد. اما در شکل ( ۱-  $g = d$  و آ) شدت بسامد  
مشاهده می شـود که با افزایش بسـامد جفتشـدگی حاصل از  
برهمکنش الکترون – فونون، شدت ر سانش الکتریکی در سامانه  
افزایش می یابد در صفحه (  $Z = 2$ ) نقاط زین اسبی تولید می شود.  
بنابراین با اعمال بر همکنش الکترون – فونون و افزایش بسـامد  
افزایش می یابد در صفحه (  $Z = 2$ ) نقاط زین اسبی تولید می شود.  
افزایش شـدت رسـاندگی آن میزان تغییرات مربوط به جابحایی فونون  
بنابراین با اعمال بر همکنش الکترون – فونون و افزایش بسامد  
افزایش شـدت رساندگی الکترون ما افزایش می یابد که این نکته بر کاهش یا  
معچنین در نقاط زین اسبی که تاثیر برهمکنش الکترون – فونون به  
فریب میرایی، رسـاند گی الکتریکی تاثیر به سـزایی می گذارد.  
افزایش شـدت رساندگی الکتریکی کاهش قابل توجهی را به دنبال  
حارد. بنابراین بسامد و انرژی مربوط به نقاط زین اسبی به صورت  
ضریب میرایی، رسانش الکتریکی کاهش قابل توجهی را به دنبال  
دارد. بنابراین بسامد و انرژی مراط به نقاط زین اسبی به صورت  
فریب میرود می برحسب ویژه  
میریب باده (  $x + 7, 7, 1) و ( ( 7, 7, 7, 1) ) و ( مر 7, 7, 7) و ( ( 7, 8) و ( ( 0 = A)) در دو حالت
در غیاب برهمکنش بین الکترون – فونون ( (  $y = y = 0$ ) در دو حالت  
در میاب برهمکنش بین الکترون – فونون (  $y = 0 = 0$ ) در دو حالت  
در ویاب برهای مربوط به حالت با بسـا مد جفتشـدگی حالت  
(  $y = e 1$ ) مربوط به حالت با بسـا مد جفتشـدگی حالت  
در و الت برو را می و  $x = 0$  ای  $x = 0$  ای  $x = 0$  ما  $x = 0$  ای  $x = 0$  ای  $x = 0$  ما  $x = 0$$ 



شود. بر طبق این نمودارها در حضور بر همکنش الکترون – فونون تحت تاثیر نیروی واداشته ، قله های تشدیدی در نزدیکی لبه ها ی نوار انرژی تقریبا ثابت بوده و بدون تغییر است. و بالاترین قله های مربوط به ضریب عبور دهی ، در انرژی های حاصل از بسامد تشدید ۲٫٦۲ = Z مربوط می شود، و در Z های بعدی به میزان نسبتا کمی در هر مورد نسبت به مورد قبلی شیفت انرژی در قله ها را مشاهده می کنیم. همچنین در حضور بر همکنش الکترون – فونون برخی از قله های تشدید انرژی در یک بسامد معین به دره تبدیل شده اند، شکل های (۲ – d q = q) و (۲ – g q ه او (



شکل ۲ : نمودارهای ضریب عبوردهی بر حسب ویژه مقادیر انرژی در زنجیره شکل ۲ : نمودارهای ضریب عبوردهی بر حسب ویژه مقادیر انرژی در زنجیره ۲۰ اتمی مربوط به ساختار Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/Al<sub>y</sub>Ga<sub>1-y</sub>As مختلف از شدت برهمکنش الکترون– فونون با مقادیر ( $0 = \lambda \ e \ 2.0 = \lambda \ e$ مختلف از شدت برهمکنش الکترون– فونون با مقادیر ( $0 = \lambda \ e \ 2.0 = 0.1$  )  $\lambda = 0.4$   $\lambda = 0.1 \ e \ y = 0.1$  )  $\lambda = 0 \ e \ y = 0.1$ 

[1]. W.Barford, Electronic and OpticalProperties Of Conjugated Polymers (Oxford University Press, 2005)

[<sup>\*</sup>]. X.H.Qiu, G.V. Nazin and W.Ho, Phys. Rev. Lett 92, 206102 (2004)

[<sup>17</sup>]. V.Coropceanu, J. Cornil, D.A. da Silva, Y. Olivier, R. Silbey, and J.L. Bredas Chem.Rev.107,926 (20007)

[\*]. Mohammad Mardaani, Hassan Rabani, Mahvash Keshavarz Physica E 44 (2015) 1342-1345

[4]. Mohammad Mardaani, Hassan Rabani, Esmat Esmaili, Ashrafalsadat Shariati, Journal of Applied Physics 118, 054306 (2015)

[\*]. M.Mardaani, H. Rabani Solid State Communications 151 (2011) 311-314

[Y]. A.A. Shokri, M. Mardaani, Chem. Phys. 330 (2006) 287

[A]. M.Mardaani, K. Esfarjani, Physica E 25 (2004), 119; Physica E 27 (2005) 227; Chem. Phys. 317 (2005) 43

[<sup>4</sup>]. A.A. Shokri, A. Saffarzadeh Phys. J.B. 42, 187-191 (2004)

[ ' ·]. S. Datta, Electonic Transport in Mesoscopic System Cambridge University Press (1997)

[11]. N.D. Langetal, Phys. Rev. Lett, 81 (1988) 3515

تفاوت که در هر یک از ســـه مورد بالا چهار نمودار ضــریب عبوردهی بر حسب ویژه مقادیر انرژی رسم شده است .



شکل ۱: نمودار تغییرات ضریب عبوردهی الکترونی برحسب تغییرات انرژی و بسامد واداشـــ ته بدون با عد در زنجیره ۲۰ اتمی مربوط به ساختار  $Al_xGa_{1-x}As/Al_yGa_{1-y}As$  در سه حالت مختلف از شدت برهمکنش الکترون – فونون ( $0 = \lambda = 0.2 = \lambda = 0.2$ ) و با در نظر گرفتن درصــد حضـور Al درون ساختار فوق با مقادیر مختلف (x = y = 0)، (x = 0.2 = x = 0.2) و (x = 0.2 = x).

Z=1,77 و Z=1/7 و Z=1/7 و Z=1/7 ) مربوط می شوند شکل ( $\pi-b$  و g و f). در حالت (x = y = 0) بالاترین ویژه مقادیر انرژی قله ها of ( $\gamma,77$  و  $\gamma,77$  و  $\gamma,77$  ) Z=1 به ترتیب مربوط به بسامدهای تشدید ( $\gamma,77$  و  $\gamma,71$  و  $\gamma,71$  و  $\gamma,71$  ) مشاهده می

#### نتيجه گيري

با کمک رهیافت تابع گرین در چارچوب بستگی قوی [۱۹و۱۱] برای زنجیره نانوسیم کوانتومی Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/Al<sub>y</sub>Ga<sub>1-y</sub>As در حضور بر همکنش الکترون – فونون برخی از قله های تشدید انرژی در یک بسامد معین به دره تبدیل شده اندکه علت آن افزایش شدت پراکندگی الکترون ها در یک طول موج و انرژی خاص است، همچنین دره های ایجاد شده با افزایش غلظت Al درون سیستم به طرف انرژی های کمتر سوق داده می شود، و با افزایش بسامد تشدید دره های ایجاد شده دارای عمق بیشتر و متمایل به انرژی های کمتر شده اند، و مقدار ضریب عبور نیز کاهش قابل ملاحظه ای دارد.

مراجع



## نامه پيوست اصلاحيه:

با سلام و خسته نباشید خدمت داوران محترم شانزدهمین کنفرانس شانزدهمین کنفرانس ماده چگال انجمن فیزیک ایران از دقت نظر داوران محترم کمال تشکر را دارم . نطرات داوران محترم در ویرایش این مقاله به شرح زیر اعمال شده است.

- چکیدہ انگیسی اصلاح گردید .
- ۲) در داخل چکیده فارسی و انگلیسی به نتایج کار اشاره
   گردید.
- ۳) در مقدمه علاوه بر شرح مختصر از کارهای قبلی انجام شده یعنی اثر برهمکنش الکترون – فونون به بدیع بودن موضوع جدید یعنی افزون جفت شدگی الکترون
   – فونون ، به بررسی اثر ناخالصی در نانو ساختارهای ناهمگن بر روی خواص ترابرد الکترونیکی ،اشاره شد. البته در کارهای مشابه بدون ماده مشخصی برای ناحیه مرکزی در نظر گرفته نشده ولی در این کار ناحیه مرکزی را به صورت نانوسیم ناهمگن متشکل از دو بخش متصل به هم Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/Al<sub>y</sub>Ga<sub>1-y</sub>As در نظر گرفته ایم.
- در مورد شکل شماتیکی در مورد سیستم مورد بررسی : امکان افزودن شکل در صورتی مقدور بود که محدودیتی در تعداد صفحات مقالات ، از طرف کمیته علمی کنفرانس در نطر گرفته نمی شد. بنابراین با افزودن شکل شماتیکی در متن مقاله تعداد صفحات بیشتر از ٤ صفحه می شد. و با دستورالعمل نوشتار مقاله تناقض ایجاد می کرد.
- ٥) در مورد Z که گفته شده چرا مقادیر Z اعداد درست و رند نیست. : با به عرض برسانم که Z های بکارگرفته شده در محاسبات عددی با کمک کد نویسی جداگانه برای نانو ساختار مورد بحث به دست آمده اند . که در متن مقاله و توضیحات و تفسیر مربوط به شکل ۱ به نتایج اعداد Z پرداخته شده است.

- ٦) در مورد مرجع ها، ایراد گرفته شده را در مقاله اعمال کرده و اصلاحات لازمه صورت گرفت.
- ۷) در رابطه Zω<sub>0</sub>=@: ایراد گرفته شده در مورد
   دیمانسیون Z در متن مقاله برطرف گردید و به بدون
   دیمانسیون بودن آن اشاره گردید. (در آن @ بسامد
   میدان خارجی و Z نیز بسامد حاصل از نیروی واداشته
   خارجی وکمیتی بدون بعد است.که آن را اصطلاحاً
   بسامد تشدید مینامیم).
  - ۸) کلمه لاتین Al در تمام متن طبق نظر داوران اصلاح
     گردید.
  - ۹) فونت متن های نوشته شده فارسی و انگلیسی و زیر نویس شکلها و دیگر متن ها مطابق دستورالعمل ارسال مقاله انجام شد.
- ۱۰) در مورد عبارت جفت شدگی اتصالات با الکترودها:
   منظور از اتصالات همان ناحیه مرکزی یا ناحیه
   پراکندگی الکترون است . که در متن مقاله نیز اصلاح
   شده و به نواحی مرکزی(پراکندگی) تغییر یافته است.
   البته الکترودها دو بخش چپ و راست متصل به ناحیه
   مرکزی بوده که از جنس طلا هستند.
   ۱۱) اشکالات متن فارسی هم بر طرف گردید .

با سپاس



# بررسی برهم کنش دامین CTLD4 گیرنده مانوز (CD206) با واکسن نانوذرات فریتین – RBD بررسی برهم کنش دامین

# ويروس SARS-CoV-2

رنجبر تکلیمی، محمد <sup>۱</sup>؛عظیمزاده ایرانی، مریم<sup>۲</sup>

<sup>ا و ۲</sup> دانشکاه علوم و فناوری زیستی، دانشگاه شهیاد بهشتی، تهران، ایران.

## چکیدہ

یکی از بهترین و مؤثرترین راههای پیشگیری از بیماریها در بهداشت عمومی، واکسیناسیون است. تمرکز تحقیقات در این زمینه روی واکسنهای زیرواحد یا اجزای آنتی ژنی مشتق شده از پاتوژنها میباشد. فریتین اخیراً بهعنوان یک بستر پروتئینی قابل اعتماد برای ارائه آنتی ژن مشتخ شده است. این پروتئین علاوه بر ایجاد واکسن، در نانو بیوتکنولوژی برای هدف گیری سلولی، سنتز بیومیمتیک، دارورسانی و تصویربرداری زیستی به کار می رود. واکسن نانو درات فریتین - دامین اتصال گیرنده (GBR) برای سندرم حاد تنفسی کرونا ویروس ۲ (SARS-CoV-2) با استفاده از مدل سازی مولکولی و شبیه سازی دینامیک مولکولی طراحی شده است. در این نانو درات فریتین - دامین اتصال گیرنده (GBR) برای سندرم حاد تنفسی کرونا ویروس ۲ (SARS-CoV-2) با استفاده از مدل سازی مولکولی و شبیه سازی دینامیک مولکولی طراحی شده است. در این مطالعه برهمکنش این واکسن با چهارمین دامین اتصال (CTLD4) با استفاده از مدل سازی مولکولی و شبیه سازی دینامیک مولکولی طراحی شده است. در این مطالعه برهمکنش این واکسن با چهارمین دامین لکتین مانند (CTLD4) با استفاده از مدل سازی مولکولی و شبیه سازی دینامیک مولکولی طراحی شده است. در این مطالعه برهمکنش این واکسن با چهارمین دامین لکتین مانند (CTLD4) کیرنده مانوز (CD206) با استفاده از مدل سازی دولکی مولکولی مورد بررسی قرار گرفت. به این مطالعه برهمکنش این واکسن با چهارمین دامین لکتین مانند (CTLD4) کیرنده مانوز (CD206) با استفاده از مدل سازی مولکولی مولکولی برای این مولکولی برای این مولکولی برای این واکسن با چهارمین دامین لکتین مانند از CD206 توسط 2 CD206 مورد گرفت. همچنین از داکینگ مولکولی برای بررسی بررسی برهمکنش بین ولکس برای محل اتصال CD207 توسط 2 CD206 از لحاظ موقعیت فضایی مانعی برای محل اتصال RBD این مولکولی برای ولین بررسی برمکن برای مرکن بین و واکسن قریتین محل ماند از CD206 توسط 2 CD206 از لخاف موقعیت فضایی مانعی برای مولکولی برای بررسی بررسی برای می برای ماند برای مارد مان تو مولکولی برای اولکن برای مولکولی برای این بررسی بررسی بررسی برمک مولکولی برای مولکولی برای مولکولی برای مولکولی برای ولیز برای مولکولی مولکولی محل اتصال CD206 تو مولکولی مولرین در بو مولکولی بررسی بررسی بررسی برود بو مولی مانی بررسی برود مولهای استای را (ACD2) بولکولی بیز بر مولکولی مولکولی مولکولی مولکول

واژه های کلیدی: واکسن نانوذرات، فریتین، سندرم حاد تنفسی کرونا ویروس ۲، گیرنده مانوز، مدل سازی مولکولی

# Investigating the interaction of mannose receptor (CD206) with ferritin-RBD nanoparticle vaccine of SARS-CoV 2 virus

#### Ranjbar Taklimi, Mohammad<sup>1</sup>; Azimzadeh Irani, Maryam<sup>2</sup>

<sup>1,2</sup> Faculty of Life Sciences and Biotechnology, Shahid Beheshti University, Tehran, Iran.

#### Abstract

Vaccination is one of the best and most effective ways to prevent diseases in public health. The focus of research in this field is on subunit vaccines or antigenic components derived from pathogens. Ferritin has recently been recognized as a reliable protein platform for antigen presentation. In addition to creating vaccines, this protein is used in nanobiotechnology for cell targeting, biomimetic synthesis, drug delivery, and bioimaging. A ferritinreceptor binding domain (RBD) nanoparticle vaccine for acute respiratory syndrome coronavirus 2 (SARS-CoV-2) has been recently designed using molecular modeling and molecular dynamics simulations. Here, the interaction of this ferritin-RBD vaccine with the fourth lectin-like domain (CTLD4) of the mannose receptor (CD206) was investigated using molecular modeling tools. To do this, the complete structure of eight lectin-like domains of CD206 was predicted by Alpha Fold 2 for the first time. Molecular docking was then used to investigate the interaction between CTLD4 and the ferritin-RBD vaccine. The results show that the binding of CTLD4 does not interrupt the binding site of RBD with ferritin or the binding site of RBD and its receptor on the surface of human cells (ACE2) in terms of spatial position. This observation indicates the possibility of recognizing this vaccine by the CTLD4 domain in the body and the role of the mannose receptor in vaccine immunogenicity.

Keywords: Nanoparticle vaccine, Ferritin, SARS-CoV-2, Mannose receptor CD206, Molecular Modeling



مقدمه

واکسنها بهعنوان یکی از کارآمدترین ابزارهای پیشگیری از بیماری، از برجستهترین ابزارهای زیستی در مدیریت سلامت عمومی هستند. علاوه بر این، واکسیناسیون بهعنوان عامل مهمی در افزایش امید به زندگی در طول قرن گذشته شناخته شده است. واکسنهای سنتی از میکروارگانیسمها یا ویروسهای ضعیف، غیرفعال یا کشته شده ساخته می شوند. درحالی که واکسن های ضعيف شده به دليل امكان فعالشدن دوباره خودبهخودي ميكروارگانيسم مي توانند خطر آفرين باشند، فرايند ساخت واکسن های غیرفعال ممکن است به پپتیدهای آنتی ژنی آسیب رسانده و اثر واکسن را کم کند. یک یا دو دوز واکسن حاوی یک میکروارگانیسم واکسن،های زیرواحد یا اجزای آنتی ژنی تولید شده از پاتوژنها، به دلیل پتانسیل آنها برای پاسخگویی به مخاطرات ايمني و كارايي واكسنهاي معمولي، كانون تحقيقات بودهاند. شواهد قوی وجود دارد مبنی بر اینکه آنتیژنهای مونومری محلول کمتر از آنتیژنهای متصل به نانوذرات بهعنوان واکسن مؤثر هستند. میل ترکیبی بین سطح نانوذره و غشای سلولی به جذب سلولی کارآمدتر آنتیژنهایی که به نانوذره متصل هستند کمک مي کند [۲–٤].

پروتئین فریتین یک پروتئین ذخیرهکننده آهن است که در اغلب موجودات زنده یافت میشود. اخیراً، فریتین بهعنوان یک بستر بادوام برای ارائه آنتیژن به سیستم ایمنی شناخته شده است. کمپلکس پروتئین فریتین، علاوه بر توانایی خودآرایی، پایداری حرارتی و PH فوقالعادهای را نشان میدهد. زیست سازگاری، زیست تخریبپذیری، تولید در مقیاس بزرگ با هزینه کم، حفره توخالی با قابلیت مونتاژ/جداسازی برگشت پذیر، و قابلیت اتصال سطحی با روشهای شیمیایی یا ژنتیکی از دیگر ویژگیهای این هدف گیری سلولی، سنتز بیومیمتیک، دارورسانی و تصویربرداری زیستی علاوه بر توسعه واکسن استفاده شده است. اخیراً سه مدل SARS- زیرنده این اتصال گیرنده SARS-

(RBD<sup>1</sup>) CoV-2 شامل ساختار بدون قند ، ساختار دارای قند و ساختار ارتقا یافته با قند در سطح ارتباط فریتین – RBD، با استفاده از مدلسازی مولکولی و شبیهسازی دینامیک مولکولی طراحی شده است. نشانداده شده است که افزودن قندها به سطح ارتباط فریتین – RBD باعث پایداری کمپلکس و بهبود عملکرد نانوذره می شود [٥-۷].

به دلیل نقش حیاتی اضافهشدن قند به پروتئینهای ویروسی در بیماریزایی ویروسها، تحقیقات بسیاری روی گیرندههای متصل شونده به قندها (بهاصطلاح لکتینها) که بر سطح سلولهای ایمنی قرار دارند انجام شده است. لکتینها قادر به شناسایی ساختارهای قند روی ویروسها و برانگیختن پاسخهای ایمنی به دنبال این شناسایی هستند.

در این مطالعه با بررسی برهمکنش واکسن طراحی شده با گیرنده مانوز سطح سلولهای دندرتیک، به امکان دخیل بودن مکانیسم عمل این گیرنده در ایمنیزایی این واکسن پرداخته شده است. گیرنده مانوز (CD206) یک پروتئین گذرنده از غشا است. بخش خارج سلولی گیرنده که مسئول اتصال به باقیماندههای مانوز است، از هشت دامین لکتین مانند نوع C (CTLD<sup>2</sup>) تشکیل شده است. این گیرندهها به فراوانی در سلولهای عرضهکننده آنتیژن (مانند سلول دندرتیک) بیان می شوند و پردازش و ارائه آنتیژن از طریق مسیرهای HHC I و MHC I را، به عنوان پیش نیاز برای تولید پاسخهای ایمنی هومورال و سلولی، کنترل می کنند [۸].

مدف از این مطالعه شناسایی اپیتوپ برهمکنش بین دامین CTLD4 و واکسن طراحی شده است.

روش کار

از آن جایی که ساختار کریستالی که شامل تمامی هشت دامین الکتین مانند گیرنده مانوز باشد در بانک اطلاعات پروتئین RCSB وجود نداشت؛ این ساختار با استفاده از الگوریتم AlphaFold 2 که از طریق همکاری با Google Colab در دسترس عمومی قرار گرفته است پیشبینی شد.

<sup>1</sup> Receptor Binding Domain

<sup>2</sup> C-Type Lectin like Domain





شکل ۱: ساختار پیشربینی شده توسط الگوریتم Alpha Fold 2. هرکدام از دامینها با رنگهای متفاوت نشان داده شده اند. چهارمین دامین که تمرکز این مطالعه است با رنگ زرد مشخص است.

برای انتخاب ساختار کریستالی اولیه مناسب برای داکینگ مولکولی، از ساختار بارگذاری شده در بانک اطلاعات پروتئین با شناسه 7JUB استفاده شد. این ساختار حاوی اطلاعات مربوط به بلوره چهارمین CTLD از گیرنده مانوز میباشد. از آنجایی که در مقالات آورده شده است که شناسایی اصلی مانوز توسط این دامین انجام می شود، در این مطالعه نیز از این دامین استفاده شده است [۹].

داکینگ مولکولی توسط سرور 2.4 HADDOCK انجام شد. تغییرات ساختار نانو واکسن شامل: (۱) تغییر قالب نام اسیدهای آمینه از قالب مربوط به شبیهسازی مولکولی به قالب قابل شناسایی توسط سرور HADDOCK، (۲) حذف ساختارهای قندی موجود به دلیل عدم امکان شناسایی آنها در سرور HADDOCK، (۳) لیبل گذاری اسیدهای آمینه مربوط به فریتین و RBD تحت زنجیرههای مجزا. تغییرات ساختار گیرنده شامل: (۱) حذف مولکولهای غیر دامین پروتئین مانند آب، یون از ساختار، (۲) حذف مختصات با شناسه MISOU از ساختار. سرور نتایج داکینگ مولکولی را در ۱۱ کلاستر طبقهبندی کرد. ابتدا تمامی اعضای کلاسترها از نظر عدم وجود تداخل فضایی محل

(RBM<sup>3</sup>) یا فریتین بررسی شدند؛ سپس ساختار مطلوب بر اساس امتیازدهی سرور به پایداری ساختار انتخاب شد. امتیازدهی سرور بر اساس معیاری از نیروهای واندروالس و الکترواستاتیک بین گیرنده و نانو واکسن است. پس از انتخاب ساختار موردنظر، قندهای حذف شده از ساختار واکسن و یون حذف شده از ساختار گیرنده از طریق align کردن

نتايج و بحث

به ساختار نهایی اضافه شدند.

یکی از دادههای خروجی از الگوریتم Alpha Fold 2 نمودار خطای پیش بینی شده تراز (PAE<sup>4</sup>) است. در این نمودار محورهای عمودی و افقی شماره آمینواسیدها میباشند. با طیف رنگ آبی (كمترين خطا) تا قرمز (بيشترين خطا) به ميزان احتمال خطا در قرارگیری هر جفت از آمینواسیدها نسبت به هم امتیاز داده می شود و در نهایت یک نقشه حرارتی تشکیل می شود. شکل ۲ که نمودار مربوط به ساختار پیش بینی شده هشت دامین است نشان می دهد که: (۱) هرکدام از دامینها به تاخوردگی درست خود رسیدهاند؛ زیرا خطای پیش بینی شده در محدوده هر دامین برابر صفر است. (۲) خطهای افقی با میزان خطای بالا که در نمودار مشخصاند مربوط به لوپهای آمینو اسیدی بین دامینها میباشند. عدم اطمینان در موقعیت آنان به دلیل ساختار لوپ مانند قابل انتظار است. (۳) باتوجهبه نمودار، موقعیت فضایی چهار دامین اول نسبت به یکدیگر و همچنین چهار دامین دوم نسبت به یکدیگر خطای کمی دارد. این در حالی است که موقعیت فضایی چهار دامین اول نسبت به چهار دامین دوم خطای بالایی دارد. این می تواند به دلایل مختلفی مانند تأثیر سایر بخشهای پروتئین در شکل گیری موقعیت این دو بخش نسبت به هم یا وجود تأثیر عوامل یونی در ساختار (که این جا در نظر گرفته نشده است) باشد. البته این نتیجه را نیز می توان گرفت که این دو بخش به طور مجزا از یکدیگر توانایی موقعیت گیری فضایی دارند.

<sup>3</sup> Receptor Binding Motif

<sup>4</sup> Predicted Alignment Error





این مطالعه نشان میدهد بر همکنش دامین CTLD4 گیرنده با واکسن از لحاظ انرژتیک و شکل ساختار فضایی مطلوب است که میتواند بیانگر امکان وقوع این برهمکنش بدن و نقش داشتن آن در ایمنیزایی واکسن باشد.

مرجعها

- Karch, C.P. and P. Burkhard, Vaccine technologies: From whole organisms to rationally designed protein assemblies. Biochem Pharmacol, 2016. 120: p. 1-14.
- [Y] Pollard, A.J. and E.M. Bijker, A guide to vaccinology: from basic principles to new developments. Nature Reviews Immunology, 2021. 21(2): p. 83-100.
- [r] Rehm, B.H.A., Bioengineering towards self-assembly of particulate vaccines. Current Opinion in Biotechnology, 2017.
   48: p. 42-53.
- [1] Vetter, V., et al., Understanding modern-day vaccines: what you need to know. Annals of Medicine, 2018. 50(2): p. 110-120.
- [•] Nahar, U.J., I. Toth, and M. Skwarczynski, *Mannose in vaccine*

*delivery.* Journal of Controlled Release, 2022. 351: p. 284-300.
[1] Chiou, B. and J.R. Connor, *Emerging and Dynamic Biomedical*

Uses of Ferritin. Pharmaceuticals, 2018. 11(4): p. 124.
[v] Laufberger, V. Sur la cristallisation de la ferritine. Bull. Soc.

Chim. Biol., 1937(19): p. 1575–1582.

- [A] Rodrigues, M.Q., P.M. Alves, and A. Roldão, *Functionalizing Ferritin Nanoparticles for Vaccine Development*.
   Pharmaceutics, 2021. 13(10): p. 1621.
- [4] Cummings, R.D., The mannose receptor ligands and the macrophage glycome. Current Opinion in Structural Biology, 2022. 75: p. 102394.



شکل ۲: نمودار خطای پیش بینی شده تراز (PAE) برای ۸ دامین لکتین مانند گیرنده مانوز CD206.

از بررسی نتایج داکینگ مولکولی کلاسترهای ۸ ۹ و ۱۱ تنها کلاسترهایی بودند که مناسب ترین Z-score و امتیاز HADDOCK را داشتند. باتوجهبه اطلاعات این سه کلاستر که در جدول ۱ آمده است، به دلیل میزان z-score پایین تر و همچنین برهمکنش الکترواستاتیک قویتر، کلاستر ۸ برای انتخاب ساختار منتخب در نظر گرفته شد. همانطور که از شکل ۳ مشخص است، در این کلاستر قرارگیری دامین CTLD4 روی RBD موجب بهم خوردن ساختار واکسن نمی شود و از لحاظ موقعیت فضایی مانعی برای اتصال RBD به فریتین یا ACE2 ایجاد نمی کند.

جدول ۱: اطلاعات کلاسترهای ۸، ۹ و ۱۱

	کلاستر ۸	کلاستر ۹	کلاستر ۱۱
امتياز HADDOCK	110/7 +/- 77/8	1 TT/7 +/- A/V	11/17 +/- 51/1
اندازه كلاستر	٥	٥	٤
RMSD از ساختار با	۲/۱ +/- ۰/۲	٤/٣ +/- •/٢	۹/۳ +/- ۱۱
كمترين انرژى			
انرژی واندروالس	-77/1 +/- 7/V	-A2/+ +/- ٣/V	-A•/• +/- £/A
انرژى الكترواستاتيك	-٣٦٢/٣ +/- ٦٧/٢	-75.14 +/- 11/2	-221/4 +/- 27/1
Z-score	-1/0	-1/•	_•/٩



شکل ۳: شکل ساختار کلاستر ۸ رنگ آبی دامین CTLD4 و رنگ سبز واکسن را نشان میدهد.





مقدمه

# بررسی ویژگی های جذب و الکترونیکی گازهای OO، CO و NH3 روی ورقه بروفن X3

سبک دست، شیرین ٔ ؛ سلامی ، نادیا ٔ

المحروه برق الکترونیک، واحداراک، دانشگاه آزاد اسلامی، اراک، ایران ۲ گروه فیزیک، واحد یاسوج، دانشگاه آزاد اسلامی، یاسوج، ایران

## چکیدہ

ما ویژگی های الکترونیکی ورقه بروفن 33 را در غیاب و در حضور گازهای مونواکسیدکرین، مونواکسید نیتروژن و آمونیاک در چهارچوب نظریه تابعی چگالی گزارش کردیم. در این مقاله انرژی جذب، مسافت جذب، انتقال بار و طیفهای چگالی بار روی ورقه بروفن X3 بررسی شده است مشخصه های الکتریکی و انرژی جذب حسگر نشان داد که ورقه بروفن X3 حساسیت خوبی در تشخیص مولکول های گازهای مونواکسیدکرین، مونواکسید نیتروژن و آمونیاک دارد و این فاز ورقه بروفن می تواند کاندیدای مناسبی در آینده حسگرهای گاز داشته باشد.

واژه های کلیدی: حسکر گاز، نظریه تابع چگالی، بروفن، انرژی جذب.

Investigation of adsorption and electronic properties CO, NO, NH<sub>3</sub> gases on borophene nanosheet

Shirin, Sabokdast<sup>1</sup>; Salami, Nadia<sup>2</sup>

<sup>'</sup> Department of Electrical Engineering, Arak Branch, Islamic Azad University, Arak, Iran <sup>'</sup> Department of Physics, Yasuj Branch, Islamic Azad University, Yasuj, Iran

#### Abstract

We reported the electronic properties of the  $X_3$  borophene sheet in the absence and presence of NH<sub>3</sub>, NO, CO gases in the framework density function theory (DFT). In this paper, the adsorption energy, adsorption distance, charge transfer spectrum (DOS) on the  $X_3$  borophene sheet are investigated. Sensor electrical and adsorption characteristics have shown that the  $X_3$  borophene sheet is very sensitive in detecting CO, NH<sub>3</sub>, NO gas molecules, and this phase of the borophene sheet can be a good candidate in the future of gas sensors.

Keywords: gas sensor, density function theory, borophene, adsorption energy.

به دلیل نرخ بالای سطح به حجم و خواص الکترونیکی منحصر بفردی که دارند در جهت کاربرد حسگر گاز توجهات زیادی را به خود جلب کرده است [۲]. ویژگی های الکترونیکی گازهایی مانند کربن دی اکسید، مونواکسید کربن و مونواکسید نیتروژن روی لایه ای از MOS2 نیز بررسی شده است نتایج نشان داده که لایه ی MOS2 حساسیت بالایی نسبت به گاز مونواکسید نیتروژن نسبت به دو گاز دیگری دارد [۳]. بروفن یک ماده ی دو بعدی جدید، که اخیرا تک لایه بورن تحت شرایط خلأ بسیار زیاد به طور

با پیشرفت صنایع، تولیدگازهای آلوده کننده به یک مسئله ی جدی برای سلامتی انسان تبدیل شده است لذا استفاده از حسگرهای تشخیص دهنده ی مولکول های گازهای سمی برای کنترل فرایندهای شیمیایی و کاربردهای کشاورزی و پزشکی بسیار حیاتی است از این رو طراحی حسگرهایی با حساسیت بالا، ارزان قیمت، توان مصرفی کم با زمان پاسخگویی سریع چالش برانگیز است [۱]. در دهه ی اخیر استفاده از نانو مواد دو بعدی به عنوان حسگر



## نتايج و بحث

برای شروع ما در ابتدا ساختار اولیه بروفن X<sub>3</sub> را بهینه سازی کردیم و پارامترهای ثابت شبکه بهینه شده b= ۸٫٤۷ و c= ۲٫۹۸ را که در تطابق خوبی با کارهای منتشر شده ی قبلی هستند بدست آورديم [٩]. مستطيل نقطه چين نشان دهنده ي ساختار اوليه بروفن X<sub>3</sub> است. شکل (۱–الف). در گام بعدی ما ابرسلول بروفن را با پارامترهای شبکه b=۱۷,۰۳ و c=۲٦,٤٩ برای جذب سه گاز، کربن مونواکسید، آمونیاک و مونواکسید نیتروژن ساختیم. همچنین هریک از مولکول های گاز با پارامترهای ذکر شده در بخش محاسبات به طور جداگانه بهینه سازی کردیم و طول پیوند گازهای CO، NH<sub>3</sub>، NO قبل از جذب روی سطح به ترتیب NO قبل از جذب روی سطح به ترتیب NO Å ۱٫۱۷۰ بدست آوردیم. شکل(۱–ب). سپس در مرحله ی بعد هریک از مولکول های گاز را در فاصله ی A، ۱٫۸۰ در مکان های احتمالی جذب H ،B ،T که به ترتیب نشان دهندهی اختصار مکان های بالا، پل و حفره هستند در دو جهت موازی و عمودی مورد بررسی قرار دادیم بطوریکه که اتم های N وO روبه روی سطح بروفن قرار بگيرند.



(۱-ب): ساختار مولکول های گاز پایدارترین (کمترین میزان انرژی) شکل های جذب مولکول گاز روی سطح بروفن در جهت گیری های موازی و عمودی در شکل (۲) نشان داده شده است محاسبات انتقال بار بین مولکول های گاز و ورقه بروفن با استفاده از آنالیز جمعیت مولکین انجام شده است.

موفقیت آمیزی روی سطح نقره (۱۱۱) Ag سنتز شده است [٤]. تحقيقات متعددي براي بررسي رفتار سه فاز اصلي بروفن يعنى B<sub>12</sub> striped ,X3 انجام شده است همگی نشان دادند هرسه فاز بروفن رفتار فلزی از خود نشان می دهد [٦و٥]. پایداری مکانیکی، ترمودینامیکی و دینامیکی بروفن X<sub>3</sub> و B<sub>12</sub> از striped بیشتر است [۷]. بروفن در کاربردهای پزشکی از جمله تشخیص و جذب مولکول های دی ان ای نیز عملکردی خوبی از خود نشان داده است [۸]. تاکنون فاز X3 در تشخیص گاز آمونیاک بررسی نشده است ما در این مقاله برای اولین بار از فاز X<sub>3</sub> بروفن به منظورحسگر گاز آمونیاک استفاده کردیم و آن را در مقایسه با سایر گازها يعنى مونواكسيد نيتروژن و مونواكسيد كربن قرار داديم تا عملکرد این فاز از ورقهی بروفن را به عنوان حسگر تشخیص دهندهی گاز بسنجیم پارامترهای انرژی جذب انتقال بار، کوتاهترین فاصله بين مولكول و ورقه بروفن را محاسبه كرديم سپس مشخصه های الکترونیکی جذب گازها و سطح جاذب را بدست آوردیم نتایج حاکی از پتانسیل قوی بروفن X<sub>3</sub> در تشخیص مولکول های گاز است. مقاله به این صورت سازماندهی شده است که: در بخش دوم مقاله روش محاسباتی بیان می شود بخش سوم نتایج انرژی جذب، انتقال بار و کوتاهترین فاصله بین مولکول های گاز و ورقه بروفن بیان می شود و بخش آخر با بیان نتیجه گیری به پایان می ر سد.

## روش محاسبات

همه ی محاسبات ما شامل بهینه سازی و محاسبات الکترونیکی در چهارچوب نظریه تابع چگالی با استفاده از پکیج سیستا انجام شده است. از پایه اوربیتالی DZP برای بهینه کردن همه ی سیستم ها استفاده شده است. همه ی اتم ها با فشار کمتر از ۲۰۸ eV/A بهینه سازی شده اند. انرژی قطع استفاده شده در سیستم Yor eV انتخاب شده است. یک ناحیه خلا ۲۰Å برای جلوگیری ازاندرکنش لایههای همسایه اضافه شده است. برای منطقه نمونه برداری از یک مش بندی ۲\*۲\*۱ و برای محاسبات الکترونیکی از مش بندی ۲\*۲\*۱ برای ناحیه اول بریلوئن استفاده شده است. انرژی جذب به صورت زیر تعریف شده است :

 $E_{ad} = E_{total} - E_{borophene} - E_{gas} \tag{(1)}$ 



جدول(۱): محاسبات انرژی جذب(Ead)، کوتاهترین فاصله بین سطح جاذب د و فن و مولکول های گاز (D) و انتقال بار (e)

بروحل و موقوق معالی عارم علی و مصل بارم»			
گاز های جذب شده	Ead (eV)	D (Å)	Net charge on
			gas (e)
СО	-•.٤٢٦	3.175	-•.•٣١
NH3	-1.297	۳۲.۱	-•.070
NO	-7.772	1.0.7	-•.٣٠١

	- C		
گاز	انرژی جذب	انرژی جذب	انرژی جذب
سطح جاذب	СО	NH <sub>3</sub>	NO
بروفن فاز B <sub>12 و</sub>	-1.19	-1.11	-•.90
نرم افزار Vaspو			
رفرنس [۱۰]			
سطحMoS <sub>2 و</sub>	-•.٤٤٩		٩٥٥. •−
نرم افزار سيستا و			
رفرنس [۳]			

جدول(۲): مقایسه ی انرژی جذب گازها روی اسطح بروفن B<sub>12</sub> و MoS2



شکل(۲): پایدارترین حالت های جذب مولکول های گاز در مکان های احتمالی جذب

در بررسی نمودارهای چگالی بار(DOS) هر سه مولکول گاز بعد از فرایند جذب مشاهده می شود که نزدیک سطح فرمی ورقه بروفن هیچ گونه گاف انرژی وجود ندارد. شکل (۳). نتایج طیف های چگالی بارها حاکی از خاصیت رسانایی ورقه بروفن است و این نتایج با کارهای قبلی تطابق دارد [٥]. هنگامی که مولکول گاز روی ورقه بروفن جذب می شود در پیک های چگالی بار کل نسبت به نمودار چگالی بار بروفن تنها، افزایش یا کاهشی عمده ای در علامت مثبت به معنى انتقال بار از مولكول گاز به سطح و علامت منفی به معنی انتقال بار از سطح جاذب به مولکول است. در مورد گاز NH<sub>3</sub> بیشترین انرژی جذب زمانی اتفاق می افتد که اتم N گاز NH<sub>3</sub> در مکان B قرار بگیرد در این حالت انرژی جذب و فاصله ی مولکول از سطح به ترتیب ۱,۳۹۶ eV- و Å ۱,۳۳ محاسبه شد با توجه به انرژی جذب بالا و کاهش طول پیوند در مورد این گاز، جذب شیمیایی رخ داده است. از طرف دیگر گاز NH<sub>3</sub> به میزان e ۰٫٥۳۵ بار از سطح جاذب دریافت می کند. گاز NO دارای ماهیت پارامغناطیس است. گاز NO بیشترین انرژی جذب با مقدار H مقدار ۳,۲۲٤ eV را در مکان H ایجاد کرد مسافت ایجاد شده بین مولکول و سطح بروفن Å ۱٫۵۰۲ است که با توجه به افزایش انرژی جذب و انتقال بار e ۰۰,۳۰۱ از سطح به مولکول گاز NO و كاهش مسافت بين مولكول و سطح، جذب شيميايي رخ داده است. انرژی جذب و انتقال بار قابل توجه حاکی از حساسیت این فاز بروفن نسبت به تشخیص این مولکول های گاز است. با توجه به نتایج بدست آمده واکنش بین گازهای NH<sub>3</sub> وNN با سطح بروفن X3 بیشترو جذب شیمیایی است در حالیکه واکنش گاز CO با سطح بروفن X3 کمتر و جذب فیزیکی است. از طرفی محاسبات انتقال بار نشان می دهد مولکول های گاز پذیرنده ی بار هستند. مکان H هنگامی که گاز CO و NO در جهت موازی در این مکان قرار دارند مکان مورد علاقه ی جذب این گازهاست. پایدارترین حالت (كمترين انرژى جذب)، بيشترين انتقال بار و كمترين فاصله در این مکان ایجاد شده است و برای گاز NH<sub>3</sub> هنگامی که این گاز در مکان B در جهت موازی طوری که اتم N روبه روی ورقه قرار بگیرد پایدارترین حالت را ایجاد می کند این سه حالت به عنوان پايدارترين حالتها در مرحله ي بعد براي بررسي ويژگي طیف چگالی بار مورد بررسی قرار گرفته است. ذکر جزئیات شامل مسافت مولكول از سطح بعد از فرايند بهينه سازى، انتقال بار، انرژی جذب در جدول (۱) بیان شده است. بعلاوه در جدول (۲) مواد دو بعدی دیگری در جذب گازها برای مقایسه بیان شده است. این مقادیر نشان می دهد ماده ی دو بعدی MoS<sub>2</sub> در مقایسه با فازهای مختلف ورقه بروفن اندرکنش و در نتیجه حساسیت کمتری نسبت به گازها دارد.



مرجعها

- B. Huang *et al.*, "Adsorption of gas molecules on graphene nanoribbons and its implication for nanoscale molecule sensor," *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 112, no. 35, pp. 13442-13446, 2008.
- [<sup>Y</sup>] S. Z. Butler *et al.*, "Progress, challenges, and opportunities in two-dimensional materials beyond graphene," *ACS nano*, vol. 7, no. 4, pp. 2898-2926, 2013.
- [<sup>r</sup>] A. Shokri and N. Salami, "Gas sensor based on MoS2 monolayer," *Sensors and Actuators B: Chemical*, vol., <sup>rrig</sup>pp. 378-385, 2016.
- [٤] A. J. Mannix *et al.*, "Synthesis of borophenes: Anisotropic, two-dimensional boron polymorphs," *Science*, vol. 350, no. 6267, pp. 1513-1516, 2015.
- [°] V .Shukla, A. Grigoriev, N. K. Jena, and R. Ahuja, "Strain controlled electronic and transport anisotropies in two-dimensional borophene sheets," *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 20, no. 35, pp. 22952-22960, 2018.
- [1] Z.-Q. Wang, T.-Y. Lü, H.-Q. Wang, Y. P. Feng, and J.-C. Zheng, "Review of borophene and its potential applications," *Frontiers of Physics*, vol. 14, no. 3, p. 33403, 2019.
- [V] B. Peng et al., "Stability and strength of atomically thin borophene from first principles calculations," *Materials Research Letters*, vol. 5, no. 6, pp. 399-407, 2017.
- S. Sabokdast, A. Horri, Y. T. Azar, M. Momeni, and M. B. Tavakoli, "Detection of nucleobases on borophene nanosheet: A DFT investigation," *Bioelectrochemistry*, vol. 138, p. 107721, 2020.
- [9] M. Boroun, S. Abdolhosseini, and M. Pourfath, "Separated and intermixed phases of borophene as anode material for lithium-Ion batteries," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 52, no. 24, p. 245501, 2019.
- [1·] C.-S. Huang, A. Murat, V. Babar, E. Montes, and U. Schwingenschlögl, "Adsorption of the Gas Molecules NH3, NO, NO2, and CO on Borophene," *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 122, no. 26, pp. 14665-1£TV, Y. 1A.

قله ها رخ نمی دهد تنها درنزدیک انرژی فرمیNO تغییرات جزئی وجود دارد که ممکن است به رسانایی کمک کند که این موضوع با انرژی جذب بالا و انتقال بار زیاد این مولکول نیز تطابق دارد. بنابراین سایر مولکول ها در رفتار ترابرد ورقه X3 بروفن تاثیری ندارند.



نتيجه گيرى

به طور خلاصه ما در این کار با استفاده از روش تئوری تابع چگالی ویژگی های جذب و الکترونیکی گازهای مونواکسید نیتروژن، مونواکسیدکربن و آمونیاک را روی ورقه بروفن X<sub>3</sub> در سه جایگاه H, B, H بررسی کردیم سیس با چرخش مولکول ها در دو جهت افقی و عمودی در این مکان ها، مکان جذب مورد علاقه ی هر مولکول گاز (پایین ترین میزان انرژی جذب) آنالیز شد. انرژی جذب و انتقال بار به ترتیب برای مولکول های مونواکسید نیتروژن وآمونیاک زیاد و برای گازمونواکسیدکربن به میزان کمتری بدست آمد و بهترین جایگاه برای جذب مولکول های گاز مونواکسیدکربن و مونواکسید نیتروژن در جهت موازی و مکان H در حالیکه برای گاز آمونیاک در مکان B بدست آمد. با بررسی نمودارهاو انرژی جذب مشخص شد ورقه بروفن X<sub>3</sub> بیشترین حساسیت را به گاز مونواکسید نیتروژن و بعد گاز آمونیاک ایجاد می کند. تنها مورد انتقاد استفاده از این ماده در تشخیص گازها، جذب شیمیایی گازهای آمونیاک ومونواکسید نیتروژن است که منجر به یکبار مصرف شدن این سطح جاذب میشود.





## تزریق اسپین در ساختارهای سه لایه ای با اعمال میدان های الکتریکی و مغناطیسی

شهری ناصری ، محبوبه

دانشکده فیزیک دانشگاه پیام نور ، تهران

#### چکیدہ

بهره تزریق اسپین در ساختارهای فرومغناطیس/ نیمرسانای غیر مغناطیسی/ فرومغناطیس، تحت تاثیر میدان های مغناطیسی خارجی و میدان الکتریکی مورد مطالعه قرار گرفت. مشخص شد که بهره تزریق اسپین می تواند بطور قوی تحت تاثیر میدان های الکتریکی و مغناطیسی باشد بطوریکه با افزایش این میدان ها، افزایش یابد. علاوه بر این، اثرات همبستگی بس ذره ای و تبادل، مقدار ثابت پخش را کاهش می دهند که منجر به افزایش بهره تزریق اسپین می شود. **واژه های کلیدی:** بهره تزریق اسپین، تقریب برهمکنش، تقریب پخش- نفوذ، میدان مغناطیسی، میدان الکتریکی، رسانندگی وابسته با اسپین می

#### Spin injection in trilayer structures by application of the electric and magnetic fields

#### Shahri Naseri, Mahboobeh

<sup>1</sup> Department of Physics, Payame Noor University, Tehran

#### Abstract

The spin injection efficiency in the Ferromagnetic/Nonmagnetic Semiconductor/Ferromagnetic (FM/NMS/FM) structures was studied under external magnetic and electric fields. It is found that spin injection efficiency can be strongly influenced by the magnetic and electric fields. So that, it increases with increasing of these fields. Furthermore, the effects of the many-body correlations and exchange reduce the value of the diffusion constant that leads to enhance spin injection efficiency.

**Keywords**: Spin injection efficiency, Interaction approximation, Drift-Diffusion approach, Magnetic field, Electric field, Spin dependent conductance PACS No. (72)

باشند که از دو لایه ی فلز فرومغناطیسی تشکیل شده که توسط لایه ی نیمرسانای غیر مغناطیسی از هم جدا شده اند. یکی از موضوعات مهم در این ساختارها، مطالعه بهره تزریق اسپین و عوامل موثر روی بهبود آن می باشد که مطالعاتی نیز در این زمینه صورت گرفته است. ما نقش میدان الکتریکی را در ساختارهای فرومغناطیس/ نیمرسانای غیر مغناطیسی/ فرومغناطیس مطالعه کرده[۳] و از یک سد مرزی وابسته به اسپین برای مقابله با عدم تطابق رسانندگی دو لایه فلز و نیمرسانا استفاده نمودیم. از سویی دیگر، نقش اثرات میدان مغناطیسی علاوه بر میدان الکتریکی در

مقدمه

ترابرد اسپین در ساختارهای چند لایه ای نیمرسانا، یکی از موضوعات جذاب از لحاظ تئوری و کاربردی می باشد و برای مطالعه آن، راه کارهای متعددی ارائه می شود که یکی از آن ها، تقریب نیمه کلاسیکی پخش-نفوذ می باشد[٤-١]. از طرفی دیگر، قطعات چند لایه ای با عملکرد منحصر به فرد در حوزه اسپینترونیک و با داشتن ابعاد نانومقیاس ، ذخیرهسازی دادهها و فناوری حسگرها را در دهههای گذشته متحول کردهاند. سنگ بنای این قطعات اسپینترونیکی، ترکیبات سه لایه ای بسیار نازک می

قطعات اسيينترونيک آلي [٥و٤] و ساختارهاي مگنت/ يليمر/ مگنت مورد مطالعه قرار گرفت[ ٦]. این مطالعات گواه آن است که حتی یک میدان مغناطیسی کوچک می تواند ترابرد و تزریق اسپین را بطور چشمگیری افزایش دهد. بهمین خاطر، ما در این مقاله، بهره تزریق اسپین در ساختارهای سه لایه ای فرومغناطیس/ نیمرسانای غیر مغناطیسی/ فرومغناطیس را در حضور همزمان میدان های الکتریکی و مغناطیسی مطالعه نموده و هم چنین اثرات همبستگی بس ذره ای و تبادل را به ساختار افزودیم. اولین مورد به دلیل "کشش اسپین کولن"( spin Coulomb drag) است که یک مکانیسم اصطکاک ذاتی است و زمانی عمل میکند که سرعت متوسط الکترون،های اسپین بالا و اسپین پایین با یکدیگر متفاوت باشد. دومی ناشی از کاهش "سختی اسپین طولی" (longitudinal spin stiffness) گاز الکترون برهم کنشی نسبت به گاز غیر بر همکنشی است[۱۰-۷] . هر دو اثر یعنی کشش اسپینی که نوعی همبستگی محسوب می شود و اثر سختی که نوعی تبادل محسوب می شود باعث کاهش ثابت پخش می شوند اما موبليتي بدون تغيير باقي مي ماند.

#### مدل

در این کار، یک ساختار سه لایه ای در نظر می گیریم که از فلز فرومغناطیس نیمه نامتناهی (x < 0) ، نیمرسانای غیر مغناطیسی با پهنای x که فرض می شود بسیار کوتاهتر از طول پخش اسپینی نیمرسانا ( $L_s$ ) باشد ( بطوریکه در ساخت بسیاری از قطعات مرسوم است ) و فلز فرومغناطیس نیمه نامتناهی (x < x) تشکیل شده است. لایه ها از لحاظ قطبش می توانند موازی و یا پاد موازی با یکدیگر باشند. الکترون ها از مگنت چپ به نیمرسانا تزریق می شوند بنابراین میدان الکتریکی در خلاف جهت محور X می باشد. هم چنین، میدان مغناطیسی خلاف جهت محور Y لحاظ می گردد. نمایشی از این مدل در شکل (۱) دیده می شود.

حضور میدان های الکتریکی و مغناطیسی و با در نظر گرفتن اثرات بر هم کنش کولنی می پردازیم :



شکل ۱: نمایشی از ساختار سه لایه ای فرومغناطیس/ نیمرسانای غیر مغناطیسی/ فرومغناطیس برای (a) فرومغناطیس های موازی و (b) فرومغناطیس های پادموازی در حضور همزمان میدان های الکتریکی و مغناطیسی.

$$\nabla^{2}(n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) + \frac{\mu_{s}E}{D_{s}}\nabla(n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) - \frac{(n_{\uparrow} - n_{\downarrow})}{D_{s}\tau_{s}} - \frac{g\mu_{B}B}{\hbar D_{s}}(n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) = 0$$
<sup>(1)</sup>

که  $({}_{\downarrow}n_{\uparrow})_{\uparrow}n$  چگالی حامل های غیرتعادلی الکترون های اسپین بالا (پایین)  ${}_{S}n_{}$  ( ${}_{J}n_{}$  و  ${}_{T}$  به ترتیب ثابت پخش، موبلیتی و زمان واهلش اسپینی با در نظر گرفتن بر همکنش کولنی می باشد[۷]. در غیاب میدان ها، قطبش اسپینی بصورت تابعی متقارن از مقیاس طولی  ${}_{S}n_{}$ ، در راستای X و X- افت پیدا می کند. هنگامی که میدان الکتریکی اعمال می شود قطبش اسپینی بشکل نامتقارن در می آید. برای الکترون هایی که در خلاف جهت (هم جهت) با میدان پخش می شوند قطبش اسپینی با طولی بیش از (کمتر از)  ${}_{S}n_{}$ ، افت می کند که آن را با  ${}_{L}n_{}$ ) نشان می دهیم[ ${}^{T}n_{}$ ]:

$$L_{u(d)} = \left[ +(-)\frac{\mu_{s}|E|}{2D_{s}} + \sqrt{(\frac{\mu_{s}E}{2D_{s}})^{2} + \frac{1}{D_{s}\tau_{s}} + \frac{g\mu_{B}B}{\hbar D_{s}}} \right]^{-1} \quad (\gamma)$$

با استفاده از ارتباط بین پتانسیل الکتروشیمیایی و چگالی حامل ها و حل معالات پخش– نفوذ برای آنها، می توان پتانسیل های الکتروشیمیایی را برای الکترون های اسپین بالا (پایین) <sub>(↓)</sub> در سه لایه تعیین کرد[ ۳] :

$$\begin{pmatrix} \mu_{\uparrow} \\ \mu_{\downarrow} \end{pmatrix}_{L} = e \frac{\vec{j}.\vec{x}}{\sigma_{L}^{f}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + C_{L} e \vec{j}.\hat{x} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sigma_{\uparrow,L}^{f}} \\ \frac{-1}{\sigma_{\downarrow,L}^{f}} \end{pmatrix} exp(x/L_{L}^{f}),$$
(7)

$$\mu \uparrow (\downarrow) = \pm \frac{eD_{S}}{\mu_{S}} (I - \frac{\rho \uparrow \downarrow}{\rho_{D}}) \left( 2A_{0} exp \left( -\frac{x}{L_{d}} \right) + 2A_{I} exp \left( \frac{(x - x_{0})}{L_{u}} \right) \right)$$

$$+ e\vec{E}.\vec{x} + B_{SC},$$
(§)

$$\begin{pmatrix} \mu_{\uparrow} \\ \mu_{\downarrow} \end{pmatrix}_{R} = e \vec{j} \cdot \hat{x} \left( \frac{x}{\sigma_{R}^{f}} + B_{f} \right) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + C_{R} e \vec{j} \cdot \hat{x} \left( \frac{1}{\sigma_{\uparrow,R}^{f}} \\ \frac{-1}{\sigma_{\downarrow,R}^{f}} \right) exp \left( -\frac{(x - x_{0})}{L_{R}^{f}} \right)$$

که  $(\downarrow)^{\uparrow}\sigma$ ، رسانندگی الکتریکی الکترون های اسپین های بالا (پایین) در فلز فرومغناطیس و j، جریان کل الکترون هاست که در حالت مانا، در کل ساختار ثابت است.  $L^{f}$ ، طول پخش اسپین در فرومغناطیس و شاخص L و R ، مربوط به لایه های فرومغناطیس چپ و راست می باشد. علامت +(-) در معادله (٤) مربوط به پتانسیل الکتروشیمیایی مولفه های اسپین بالا (پایین) می باشد. در اینجا،  $\downarrow \uparrow \Lambda$  مقاومت متقابل و  $\rho_{\Lambda}$ ، مقاومت درود می باشد.

شرایط مرزی زیر در  $\mathbf{x} = \mathbf{x}$  و  $\mathbf{x} = \mathbf{x}$  تعیین شوند:

$$j_{\uparrow(\downarrow)}(\bar{0}) = G_{\uparrow(\downarrow)} \left[ \mu_{\uparrow(\downarrow)}(\bar{0}) - \mu_{\uparrow(\downarrow)}(\bar{0}) \right]$$
(1)

$$j_{\uparrow}(\bar{0}) - j_{\downarrow}(\bar{0}) = j_{\uparrow}(\bar{0}) - j_{\downarrow}(\bar{0}) \qquad (v)$$

$$j_{\uparrow(\downarrow)}(x_0) = \widetilde{G}_{\uparrow(\downarrow)} \left[ \mu_{\uparrow(\downarrow)}(x_0) - \mu_{\uparrow(\downarrow)}(x_0) \right] \tag{A}$$

$$\dot{j_{\uparrow}(x_0)} - \dot{j_{\downarrow}(x_0)} = \dot{j_{\uparrow}(x_0)} - \dot{j_{\downarrow}(x_0)}$$
(9)

که <sub>(ب)†</sub>G و <sub>(ب)†</sub>G، رسانندگی وابسته به اسپین در مرزهای سمت چپ و راست نیمرسانا است.

## نتايج حل تحليلى

در این بخش، اثرات میدان الکتریکی و مغناطیسی روی پارامتر بهره تزریق اسپین (*X*) در ساختار سه لایه ای فرومغناطیس/ نیمرسانای غیر مغناطیسی/ فرومغناطیس در تقریب برهمکنشی و غیربرهمکنشی، مورد مطالعه قرار می گیرد. این پارامتر به صورت نسبت تفاوت بین چگالی جریان الکترون های اسپین بالا و پایین به چگالی جریان کل تعریف می شود:

$$\alpha(\mathbf{x}) \equiv \frac{\mathbf{j}_{\uparrow} - \mathbf{j}_{\downarrow}}{\mathbf{j}_{\uparrow} + \mathbf{j}_{\downarrow}} \tag{11}$$

در شکل (۲)، بهره تزریق اسپین در مرز سمت چپ نیمرسانا به عنوان تابعی از میدان الکتریکی و میدان مغناطیسی B=8Gs در

تقریب برهمکنشی (خط پیوسته) و غیر برهمکنشی (خط ناپیوسته) و برای قطبش موازی مگنت ها نمایش داده شده است. همانگونه که اشاره شد، اثرات برهم کنش کولنی، ثابت پخش  $D_s$  را کاهش می دهد و از آنجا که طول های پخش اسپینی  $L_u$  و  $L_d$  طبق رابطه (۲)، به ثابت پخش وابسته هستند بنابراین،  $L_u$  کاهش می یابد در حالی که  $L_d$  افزایش یافته و باعث افزایش بهره تزریق می گردد که در شکل (۲)، تمایز بین تقریب برهمکنشی و غیربرهمکنشی برای چگالی حامل ( $cm^{-3}$ )  $10^{16} = n$  بوضوح دیده می شود. هم چنین، با افزایش چگالی حامل ها از دیده می شود. هم چنین، با افزایش چگالی حامل ها از  $L_d$  دام  $(cm^{-3})$   $n = 10^{16} (cm^{-3})$ کاهش و  $L_u$  افزایش یافته[۱1]، در نتیجه بهره کاهش می یابد.



شکل ۲: بهره تزریق اسپین در سمت چپ نیمرسانا به عنوان تابعی از میدان الکتریکی برای قطبش موازی و در تقریب برهمکنشی و غیربرهمکنشی و برای چگالی حامل های مختلف. پارامترهای ساختار عبارتند از:

$$\begin{split} B = & 8Gs \ , \ P_f = 0.5, \ \sigma_f = 100\sigma_s = 10^3 (\Omega cm)^{-1}, \\ G_{\uparrow} = & 2G_{\downarrow} = 10^8 (\Omega cm^2)^{-1} \ , \\ \widetilde{G}_{\uparrow} = & 2\widetilde{G}_{\downarrow} = 10^8 (\Omega cm^2)^{-1} \ and \ x_0 = & 200 \ nm. \end{split}$$

در واقع،  $L_u$  مقاومت مربوط به نیمرسانا را کنترل می کند که خود در تعیین بهره تزریق اسپین نقش دارد و با افزایش میدان الکتریکی و مغناطیسی، طول پخش اسپینی  $L_u$  کاهش می یابد









علاوه بر این، شکل (٤)، نشان می دهد که بهره تزریق اسپین به مکان وابسته است و با دور شدن از مرز تماس x = 0، بصورت خطی کاهش می یابد. در حد میدان های متوسط x =100 v/cm پتانسیل الکتروشیمیایی بصورت خطی به داخل نیمرسانا افت پیدا می کند [11] و از آنجا که جریان اسپینی با پتانسیل الکتروشیمیایی در ارتباط است بنابراین جریان اسپینی بصورت خطی کاهش یافته در حالی که جریان کل ثابت می ماند پس انتظار می رود بهره تزریق که نسبت جریان اسپینی به جریان کل هست بصورت خطی کاهش یابد.



شکل ٤: بهره تزریق اسپین  $\alpha(\mathbf{x})$  به عنوان تابعی از مکان برای قطبش موازی و در تقریب برهمکنشی و غیر برهمکنشی و برای میدان های مغناطیسی مختلف و تحت میدان الکتریکی  $\mathbf{E} = 100 \, \mathrm{V/cm}$  یارامترهای ساختار عبارتند از:  $G_{\uparrow} = 2G_{\downarrow} = 10^8 (\Omega cm^2)^{-1}, \widetilde{G}_{\uparrow} = 2\widetilde{G}_{\downarrow} = 10^8 (\Omega cm^2)^{-1}, n = 10^{18} (cm^{-3})$ بقیه پارامترها همچون شکل ۲ می باشد.

نتيجه گيرى

نتایج ما پیشنهاد یک تقریب کاربردی برای افزایش بهره تزریق اسپینی به داخل نیمرسانا را با استفاده از میدان های الکتریکی و مغناطیسی ارائه می دهد. این افزایش می تواند بسیار بهبود پیدا کند وقتی که اثرات همبستگی بس ذره ای و تبادل نیز مورد توجه قرار گیرند.

مرجعها

- [1] Z. G. Yu and M. E. Flatt'e, Phy.Rev B, 66, (2002) 201202 (R).
- [2] Z. G. Yu and M. E. Flatt'e, *Phy.Rev.B*, **66**, (2002) 235302.
- [3] S. F Shayesteh and M.S Naseri, *J Supercond Nov Magn*, **26**, (2013) 141.
- [4] M. S Naseri, J Supercond Nov Magn, 31, (2018) 2283.
- [5] Y. Qi and S. Zhang, Phys. Rev. B, 67, (2003) 052407.
- [6] Z. G. Yu, M. A. Berding, and S. Krishnamurthy, *Phys. Rev. B*,71, (2005) 060408(R).
- [7] I. D'Amico and G. Vignale, Phys. Rev. B, 62, (2000) 4853.
- [8] I. D'Amico and G. Vignale, Europhys. Lett, 55, (2001) 566.
- [9] I. D'Amico and G. Vignale, Phys. Rev. B, 65, (2002) 085109.
- [10] I. D'Amico and G. Vignale, Phys. Rev. B, 68, (2003) 045307.
- [11] I. D 'Amico, *Phys. Rev B*, **69**, (2004) 165305.





## ساختار نواری و ویژگیهای توپولوژیکی MoP و MoN

نامجو ، شیرین<sup>۱</sup> ؛ هاشمی فر، سید جواد<sup>۲</sup> <sup>اگ</sup>روه فیزیک، دانشگاه لرستان ، خرم آباد ۲دانشکاده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان ۸٤۱٥۶۸۳۱۱۱

#### چکیدہ

خواص ساختاری و الکترونی MoP و MoN با استفاده از نظریه تابعی چگالی و با به کارگیری کد محاسباتی Wien2k مورد بررسی قرار گرفته است. ساختارهای نواری محاصب شده نشان می دهند که بلورهای شش وجهی MoP و MoN شبه فلزات توپولوژی هستند که میزبان نقاط تبهگن سه گانه ای حاصل از تقاطع بین یک نوار غیر تبهگن و یک نوار با تبهگن سه گانه در امتداد مسیر FA می باشند. نقاط تبهگن سه گانه در MoP در گستره انرژی ۱٫۵۲ – تا ٤٤/۰ – الکترون ولت نسبت به سطح فرمی قرار گرفته اند می دوگانه در امتداد مسیر FA می باشند. نقاط تبهگن سه گانه ای حاصل از تقاطع بین یک نوار غیر تبهگن و یک نوار با تبهگنی دوگانه در امتداد مسیر FA می باشند. نقاط تبهگن سه گانه در MoP در گستره انرژی ۱٫۵۲ – تا ٤٤/۰ – الکترون ولت نسبت به سطح فرمی قرار گرفته اند. برای بررسی ویژگی های فرمی قرار گرفته اند. برای برای MoN در گستره انرژی ۱٫۷۲ – تا ۶۸/۰ – الکترون ولت نسبت به سطح فرمی قرار گرفته اند. برای بررسی ویژگی های قرمی قرار گرفته اند. در حالیکه این نقاط برای MoN در گستره انرژی ۱٫۷۲ – تا ۱٫۷۲ می در می قرار گرفته اند. برای بررسی ویژگی های توپولوژیکی از روش توابع وانیز بیشینه جایگزیده و سپس مراکز بار وانیر استفاده است. نتایج محاسبات حاکی از آن است که ناوردای توپولوژیکی غیربدیهی Z2 برای است. نتایج محاسبات حاکی از آن است که ناوردای توپولوژیکی غیربدیهی Z2 برای MoN در صفحه می برایر ۱ می شود. برای MoP در صفحات 0 = یا و تو به تو بر ۱ است، در حالیکه برای MoN ناوردای توپولوژیکی تنها در صفحه π=ید برابر ۱ می شود. واژه های کلیدی: ناوردای توپولوژیکی غیربدیهی، تبهگنی سه گانه، شبه فازات توپولوژی، مراکز بار ونیر

#### Band structure and topological properties of MoP and MoN

#### Namjoo, Shirin<sup>1</sup>; Hashemifar, Seyed Javad<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Lorestan university, Khorramabad <sup>2</sup> Department of Physics, Isfahan University of Technology, 8415683111 Isfahan

#### Abstract

The structural and electronic properties of MoP and MoN have been investigated using density functional theory by employing the Wien2k package. Our calculations show that hexagonal MoP, and MoN compounds are topological semimetals hosting triply degenerate points resulting from band crossing between a nondegenerate band and a doubly degenerate band along the  $\Gamma A$  direction. The triple degenerated points of MoP are located in an energy range of -1.56 to -0.48 eV, relative to the Fermi level, whereas those of MoN are in a range of -1.72 to 0.57 eV, relative to the Fermi level. In order to investigate the topological properties of these compounds, the maximally localized wannier and then wannier charge centers methods are used. The results of the calculations indicate that the nontrivial Z2 topological invariant of MoP in the  $k_z = 0$  and  $k_z = \pi$  planes is 1 while for MoN the Z2 invariant equals 1 only in the  $k_z = \pi$  plane.

*Keywords*: Nontrivial topological invariant, Triple Degenerated Point, Topological semimetal, Wannier Charge Center Method

PACS No.71, 78

فیزیک مادهچگال ظهور پیدا کرده است. ابتدا نارساناهای توپولوژیکی در کانون توجه قرار گرفتند؛ ترکیباتی که در لایههای درونی نارسانا هستند، اما در لایههای سطحی رسانندگی قطبیده و محافظت شدهای از خود نشان میدهند که برای کاربرد در زمینههای

جستجو و بررسی مواد توپولوژیکی و مطالعه ساختار الکترونی آنها در دهه گذشته به عنوان یک موضوع بسیار جذاب و مدرن در

مقدمه



خواص ساختاری و الکترونی مولیبدنیوم فسفید و همچنین موليبدنيوم نيتريد با استفاده از روش امواج تخت بهساخته خطى با پتانسیل کامل مورد محاسبه و بررسی قرار گرفتهاند. در این روش که در بسته محاسباتی WIEN2K [۱۰] بکار گرفته شده است، از تركيب توابع موج اتمى و امواج تخت براى توصيف دقيق توابع موج و پتانسیل بلوری استفاده می شود. ابتدا به بهینه سازی پارامترهای محاسباتی پرداخته شده و سپس حجم تعادلی محاسبه شده است. پارامتر R (R، شعاع کوچکترین کره موفین تین و K<sub>max</sub> ، بردار موج قطع برای بسط تابع موج بر حسب امواج تخت در ناحیه بین جایگاهی است) برابر ۸ و بردار موج قطع برای بسط پتانسیل و چگالی بار در ناحیه بین جایگاهی G<sub>max</sub>=12 انتخاب شده است. محاسبات در حضور برهمکنش اسپین- مدار انجام شده است. انتگرال فضای فاز برای محاسبه خواص ساختاری MoP و همچنین MoN با استفاده از ۳۰۰۰ نقطه k در منطقه اول بریلوئن انجام شد. از آنجا که برای بررسی ساختار نواری به تعداد نقاط k بیشتری نیازمندیم، بنابراین ۱۰۰۰۰ نقطه k انتخاب شده است. برای بررسی ساختار نواری از پتانسیل تبادلی همبستگی GGA [۱۱] استفاده شده است. بر پایه توابع وانیر بیشینه جایگزیده بدست آمده با استفاده از کد محاسباتی wannier90 [۱۲] به محاسبه ناورداهای تويولوژيکی در MoP و MoN با استفاده از کد WannierTools [۱۳] یر داخته شده است.

### نتايج

MoP و MoN در ساختار چهاروجهی متبلور میشوند و ساختار کریستالی آن ها با گروه فضایی Pōm2 مشخص میشود. ساختار کریستالی مولیبدنیوم فسفید در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱. ساختار کریستالی مولیبدنیوم فسفید (مولیبدنیوم نیترید). اتمهای مولیبدنیوم با کره های قهوهای رنگ و اتم فسفر (نیتروژن) با کره سبز رنگ نشان داده شده اند.

اسپینترونیک و ترانزیستورهای بدون اتلاف نویدبخش هستند [۱]. در سالهای اخیر توجه از عایقهای توپولوژیکی به سمت شبهفلزات توپولوژیکی معطوف شده است. این انتقال از عایقهای توپولوژیکی به سمت شبهفلزات توپولوژیکی، با کشف نظری شبهفلزات وایل [ ۲-۵] و سپس شبهفلزات دیراک صورت گرفت [۸-۸]. تحقق تجربی شبهفلزات دیراک و وایل در سالهای اخیر شبهفلزات توپولوژیکی را به زمینهای بسیار قابل توجه در پژوهشهای مادهچگال کوانتمی تبدیل کرده است. شبهفلزات دیراک و وایل در واقع بلورهای میزبان فرمیونهای دیراک و وایل بهعنوان شبهذراتی نوظهور هستند. برانگیختگیهای الکترونی کمانرژی در یک شبهفلز توپولوژیکی منجر به شکل گیری فرمیون های بدون جرم در این ترکیبات می شود که این موضوع مشاهده بسیاری از پدیدههای کوانتمی را در انرژیهای پایین امکانپذیر میکند و میتواند کاربردهای ویژهای در الکترونیک و اسپینترونیک داشته باشد. پیش-بینی میشود که این دسته از شبهفلزات در مدارهای الکترونیکی با توان مصرفی پایین و همچنین اسپینترونیک بسیار کاربرد داشته باشند. در سال ۲۰۱۷ دسته جدیدی از شبهفلزات توپولوژیکی حاوی فرمیونهای سه مولفهای معرفی شدند. از جمله این شبهفلزات می-توان به موليبدنيوم فسفيد (MoP) اشاره كرد كه رفتار شبهفلزى توپولوژیکی و فرمیونهای جدید سهمولفهای در آن بصورت تجربی و با طیفنگاری ARPES مشاهده شده است [۹]. از شبهفلزات سهمولفهای می توان به عنوان یک حالت میانی بین شبهفلز دیراک و وایل نام برد که میتوانند تحت تاثیر یک اختلال خارجی به شبهفلزات وایل یا گرهچین (nodal line) تبدیل شوند. از آنجا که محاسبات ابتدا به ساکن، یک ابزار موفق و موثر در پیشبینی مواد توپولوژیکی جدید و همچنین شناخت ویژگیهای برجسته مواد در فاز توپولوژیکی به شمار میرود، هدف اصلی در این مطالعه، استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن مبتنی بر نظریه تابعی چگالی برای بررسی خواص توپولوژیکی پنیکتایدهای مولیبدن (Mopnictides) از قبیل MoP و MoN مى باشد.

روش و جزئیات محاسبات



در بلور MoN (MoN) ، اتمهای Mo و N (N) به ترتیب در موقعیتهای وایکوف (1/3,2/3,1/2 و (1/3,2/3,1/2 قرار گرفته-اند.

با استفاده از ثابت شبکه تعادلی، ساختار نواری MoP و MoN با در نظر گرفتن برهم کنش اسپین– مدار مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات مربوط به بررسی ساختار نواری MoP و MoN حاکی از آن است که مولیبدنیوم فسفید و مولیبدنیوم نیترید شبه فلزات توپولوژیکی هستند. این محاسبات وجود یک وارونگی نواری را در نقطه A در منطقه اول بریلوئن نشان میدهد.



شکل۲. ساختار نواری MoP و MoN در حضور برهم کنش اسپین- مدار

این وارونگی نواری منجر به یک قطع شدگی نواری در راستای مسیر Γ-A می شود. این امر به خوبی در شکل ۲ نشان داده شده است. این قطع شدگی نواری بصورت ٤ نقطه تبهگن سه گانه در ساختاری نواری بروز پیدا می کند. به منظور نشان دادن این نقاط به طور واضح تر، ساختار نواری MoP و MoN در راستای مسیر A-T در شکل ۳ نشان داده شده است. همانگونه که شکل ۲ نشان می دهد، مولیبدنیوم نیترید دارای ساختار نواری مشابه ساختار نواری مولیبدنیم فسفید در امتداد مسیر A-T می باشد با این تفاوت که نقاط تبگهن سه گانه در انرژی های متفاوت تری نسبت به MoP قرار گرفته اند.

این نقاط تبهگن در MoP به سطح فرمی نزدیک تر هستند. نقاط تبهگن سه گانه در MoP در گستره انرژی ۱/۵٦- الکترون- ولت تا ۰/٤٨- الکترون- ولت نسبت به سطح فرمی قرار دارند در حالی که این نقاط در MoN در گستره انرژی ۱/۷۲- الکترون-ولت تا ۰/٥٧ الکترون ولت نسبت به سطح فرمی قرار دارند.



شکل ۳. ساختار نواری MoP ( بالا) و MoN (پایین) در راستای مسیر Γ-A. در شکل فوق نقاط تبهگن سه گانه با TP<sub>3</sub> ، TP<sub>2</sub> ، TP<sub>1</sub> و TP<sub>4</sub> نشان داده شده اند.

گرچه وجود وارونگی در ساختار نواری می تواند نشانه ای بر وجود فاز توپولوژیکی غیر بدیهی در یک ترکیب باشد، اما پیش بینی دقیق تر فاز توپولوژیکی نیاز به محاسبه پارامتر توپولوژیکی Z2 دارد. همان-گونه که در شکل ۲ نشان داده شده است، ساختار الکترونی MoP کونه که در شکل ۲ نشان داده شده است، ساختار الکترونی K<sub>z</sub>= $\pi$ و MoN در صفحه  $k_z=0$  (مسیر TMK) و همچنین صفحه  $k_z=\pi$ (مسیر ALH) یک گاف نواری بین نوار رسانش و ظرفیت نشان می دهد. بنابراین در این صفحات سیستم می تواند به صورت یک عایق دو بعدی با عملگر وارونی زمان در نظر گرفته شود و می توان برای مشخص کردن توپولوژی نواری در این سیستم ها از ناوردای توپولوژیکی Z2 استفاده کرد. برای محاسبه این ناورداها کد



مولیبدنیوم نیترید شبهفلزاتی توپولوژیکی هستند که دارای قطع-شدگی نواری در مسیر ۲۸ هستند. این قطع شدگی نواری به صورت ٤ نقطه تبهگن سهگانه در ساختار نواری این بلورها در امتداد مسیر ۲۸ بروز پیدا میکند. نزدیک ترین نقطه به سطح فرمی در (MoN) MoP ، در فاصله ۸۵/۰ الکترون ولتی ( فاصله ۰/۵۷ الکترون ولتی) نسبت به سطح فرمی قرار دارد. بنابراین مولیبدنیوم فسفید و مولیبدنیوم نیترید میتوانند سهم قابل توجهی در برانگیختگیهای الکترونی کمانرژی داشته باشند.

## مراجع

[<sup>1</sup>]. M. Z. Hasan, and C. L. Kane, "Colloquium : Topological insulators," Reviews of Modern Physics **82**, 3045-3067 (2010).

[Y]. X. Wan, A. M. Turner, A. Vishwanath, and S. Y. Savrasov, "Topological semimetal and Fermi-arc surface states in the electronic structure of pyrochlore iridates," Phys. Rev. B **83**, 205101 (2011).

[<sup>r</sup>]. A. A. Burkov, and L. Balents, "Weyl Semimetal in a Topological Insulator Multilayer," Phys. Rev. Lett. , **107**, 127205 (2011).

[\*]. H. Weng, C. Fang, Z. Fang, B. A. Bernevig, and X. Dai, "Weyl Semimetal Phase in Noncentrosymmetric Transition- Metal Monophosphides," Phys. Rev. X 5, 011029 (2015).

[<sup>b</sup>]. S.M. Huang et al, "A Weyl Fermion semimetal with surface Fermi arcs in the transition metal monopnictide TaAs class," Nature Communications 6, 7373 (2015).

[<sup>7</sup>]. S. M. Young. et al, "Dirac Semimetal in Three Dimensions," Physical Review Letters **108**, 140405 (2012).

[Y]. Z. Wang. et al, "Dirac semimetal and topological phase transitions in A3Bi (A=Na, K, Rb)," Phys. Rev. B 85 **85**, 195320 (2012.(

[^]. Z. Wang ,H. Weng, Q. Wu, Xi. Dai, and Z. Fang, "Three-dimensional Dirac semimetal and quantum transport in Cd3As2," Phys. Rev. B **88**, 125427 (2013)

[4].B. Q. Lv, Z. L. Feng, Q. N. Xu, X. Gao, J. Z. Ma, L. Y. Kong, P. Richard, Y. B. Huang, V. N. Strocov, C. Fang, H. M. Weng, Y. G. Shi, T. Qian, and H. Ding, "Observation of three-component fermions in the topological semimetal molybdenum phosphide," Nature 546, 627 (2017).

[1]P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka, and J. Luitz, WIEN2K, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties) Karlheinz Schwarz, Techn. Universität Wien, Austria, 2001.

 [<sup>1</sup>]. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, "Generalized Gradient Approximation Made Simple " Physical Review Letters 77, 3865 (1996).
 [<sup>1</sup>Y]. A .A. Mostofi, J. R. Yates, Y.-S. Lee, I. Souza, D. Vanderbilt, and N. Marzari, "wannier90: A tool for obtaining maximally-localised Wannier functions," Computer Physics Communications 178, 685-699 (2008).

 [1<sup>\*</sup>]. Q. Wu, S. Zhang, H.-F. Song, M. Troyer, and A. A. Soluyanov, "WannierTools: An open-source software package for novel topological materials," Computer Physics Communications 224, 405-416 (2018).
 [1<sup>\*</sup>]. Yu, R., Qi, X. L., Bernevig, A., Fang, Z. & Dai, X. Equivalent expression of Z2 topological invariant for band insulators using the non-Abelian Berry connection. *Phys. Rev. B* 84, 075119 (2011). Z2 از روش مراکز بار توابع وانیر (WCCs) استفاده شده است [ X1]. در این روش با شمارش تعداد دفعاتی که خطوط مراکز بار وانیر خط مرجع اختیاری را که به موازات vk رسم شده است، قطع  $k_z = \pi$  و  $k_z = 0$  رسم شده است، قطع  $k_z = \pi$   $k_z = 0$   $k_z = 0$   $k_z = \pi$   $k_z = \pi$   $k_z = \pi$   $\lambda$  محاسبه شده است. نتایج برای دو صفحه  $k_z = \pi$   $k_z$  در شکل  $k_z = \pi$   $k_z = 0$   $k_z = 0$   $k_z = \pi$   $k_z$  در شکل  $\lambda$  آورده شده است. مطابق نتایج به دست آمده، برای MoP، ناوردای  $k_z = \pi$   $k_z = \pi$   $k_z = 0$   $k_z = \pi$   $k_z = \pi$   $k_z$   $k_z = \pi$   $k_z = 0$   $k_z = \pi$  و این صفحات، صفحات توپولوژیکی غیر بدیهی هستند زیرا خطوط  $k_z = 0$   $k_z = 0$   $k_z = 0$   $k_z = 0$  می کند در حالی  $k_z = 0$   $k_z = 0$   $k_z = 0$  می کند در حالی  $k_z = 0$  می کند در حالی طوط مراکز بار وانیر، هر خط مرجع  $k_z = 0$  رسم شده است، در صفحه  $k_z = \pi$  بعداد زوج  $k_z = 0$  می کند بنابراین برای MoN، تنها  $k_z = 0$  می کند بنابراین برای MoN، تنها  $k_z = 0$  می کند بنابراین برای MoN، تنها  $k_z = 0$  می کند بنابراین برای MoN، تنها  $k_z = 0$  می کند بنابراین برای MoN، تنها



### نتيجه گيرى

با استفاده از روش امواج تخت بهساخته خطی با پتانسیل کامل، در چارچوب نظریه تابعی چگالی ساختار نواری و ویژگیهای توپولوژیکی MoP و MoN مورد بررسی قرار گرفته است. به منظور مشخص کردن توپولوژی نواری، ناوردای توپولوژیکی ZZ با استفاده از کد محاسباتی WannierTools محاسبه شده است. نتایج حاصل از بررسی ساختار نواری، نشان میدهد که مولیدنیوم فسفید و



## پمپ جریانهای اسپینی بر پایه نانو نوارهای گرافینی زیگزاگ

بوربور، فاطمه<sup>1</sup>

<sup>1</sup> دانشکده شهید بهشتی دانشگاه فرهنگیان، تهران

چکیدہ

در این مقاله پمپ کوانتومی جریان اسپینی در یک نانو نوار گرافینی زیگزاگ که تحت دو پتانسیل غیر هم فاز وابسته به زمان قرار دارد، با استفاده از روش تابع گرین که با حل معادله دایسون به دست آماده، بررسی شده است. سامانه مورد نظر شامل یک کانال رسانایی و دو الکترود همراه با عایق مغناطیسی که میدان تبادلی بر آن اعمال گردیده، می باشد. در این مقاله اثرات وابسته به پهنای نانو نوار گرافینی زیگزاگ (ZGNR) بررسی گردیده و نشان داده شده است که جریان باری پمپ شده اعمال گردیده، می باشد. در این مقاله اثرات وابسته به پهنای نانو نوار گرافینی زیگزاگ (ZGNR) بررسی گردیده و نشان داده شده است که جریان باری پمپ شده در نانو نوار گرافینی به پهنای نوار بستگی دارد. همچنین نشان داده شد که یا اعمال میدان تبادلی موازی بر روی الکترودها در نوارهای با تعداد ردیفهای فرد، باعث میشود که جریان به طور کامل و 100٪ پلاریزه گردد. تحقیقات و پژوهشهای انجام شده در این مقاله میتواند برای استفاده در افزارهای اسپیترونیک و همچنین میشود که جریان به طور کامل و 100٪

## Quantum spin pumping based on zigzag graphene nanoribbon

F. Bourbour<sup>1</sup>

1 Department of physics, Farhangian University, Tehran, Iran

#### Abstract

In this work, quantum spin pumping in zigzag graphene nanoribbon (ZGNR) under two dephase ac gate voltages by using non-equilibrium Green's function method is studied. Our proposed device consists of two leads with ferromagnetic insulator in parallel mode and a conductor channel. It is found that, the effects of width of zigzag graphene nanoribbons, the spin pumped current in the zigzag graphene nanoribbon depends on nanoribbon width. Also, it is shown that the spin splitting and thus the spin current for oddnumbers is very complete. The present study could be helpful to use in quantum computation and spintronic devices.

Keywords: Quantum pumping, green's function, graphene nanoribbon

PACS No.

ترابرد و پردازش اطلاعات از طریق اسپین در گرافین نیز از دیگر مواردی است که روی آن تحقیقات گسترده ای صورت گرفته است. ترابرد بار در غیاب یک اختلاف پتانسیل ثابت که به عنوان پدیده پمپینگ شناخته میشود یک مکانیزم جذاب مرتبط با فیزیک کوانتومی می باشد که پمپ کوانتمی نامیده میشود[<sup>۲</sup>,<sup>۳</sup>]. این مکانیزم میتواند شامل استفاده از پتانسیل های وابسته به زمان نوسانی که نسبت به

از سال ۲۰۰۴ که گرافین به جهان معرفی شد، مطالعات مختلفی روی آن صورت گرفته است، که میتوان از مهمترین آن ها به بررسی رسانش الکتریکی در نانو نوارهای گرافینی اشاره کرد[<sup>۱</sup>]. مطالعه

مقدمه



یکدیگر اختلاف فاز دارند، باشد. به همین منظور دراین مطالعه روش محاسباتی استفاده شده، فرمالیزم تابع گرین غیر تعادلی کلدیش، با استفاده از مدل تنگ بست میباشد، که میتواند جریان dc را برای انرژی فرمی های مختلف محاسبه کند[4].

در این مقاله جریان پمپ شده اسپینی که با اعمال میدان تبادلی بر الکترودها توسط زیر لایه های مغناطیسی در حضور دو پتانسیل وابسته به زمان به دست می آید، در نانو نوار گرافینی زیگزاگ با پهناهای متفاوت بررسی گردیده و نشان داده شده است که میتوان در رژیم آدیاباتیک، جریان پمپ شده 100٪ قطبیده در نانو نوار های زیگزاگ با پهناهای فرد القا نمود.

ادامه مقاله به این ترتیب سازماندهی شده است، در بخش دوم مدل نظری بر پایه روش تابع گرین کلدیش برای تولید جریان پمپ شده ارائه شده و در بخش سوم نتایج عددی این پژوهش مورد بررسی قرار گرفته است. در نهایت در بخش چهارم خلاصه ای از کارهای انجام شده و نتایج بدست آمده ارائه گردیده است.

روش تحقیق: ترابرد غیر تعادلی کوانتومی در فرمالیزم کلدیش

*N<sub>r</sub>* برای یک سیستم پمپ شده که در تماس با ذره از محیط از طریق اتصال با الکترود ها است به شکل زیر می باشد:

$$H(t) = H^{sys}(t) + H^{cont}(t) + H^{lead}(t)$$
(1)

که در آن  $H^{sys}$  هامیلتونی سیستم مرکزی یا کانال رسانایی، – (v) H<sup>cont</sup> هامیلتونی نقاط اتصال الکترودها به کانال رسانایی و H<sup>lead</sup> هامیلتونی الکترودها میباشد.

$$H^{sys}(t) = \sum_{} \left( H^{sys}_{l,l'}(t) c^{\dagger}_{l} c_{l'} + h.c. \right)$$
(2)

$$H_{l,l'}^{sys}(t) = \varepsilon_{l,l'}(\varphi) + V_{l,l'}(t,\delta_{l,l'})$$
(3)

$$V_{l,l'}(t,\delta_{l,l'}) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{-ik\Omega_0} V_{l,l'}(k)$$
(4)

$$H^{cont} = -\sum_{\alpha} w_{\alpha} \left( c_{k_{\alpha}}^{\dagger} c_{j_{\alpha}} + H.c. \right),$$
(5)

در روابط بالا <sup>†</sup><sub>l</sub> و <sub>l</sub> و <sub>l</sub> به ترتیب توابع خلق و فنای الکترون، در روابط بالا <sup>†</sup><sub>l</sub> و <sub>l</sub> و <sub>l</sub> به ترتیب انرژی جنبشی الکترون و پتانسیل وابسته به زمان اعمال شده بر نقاط اتصال الکترودها به کانال رسانایی و Wα انرژی انتقال الکترون از الکترودها به کانال رسانایی میباشند.

ابزار اصلی و اولیه تئوری کلدیش، توابع گرین تاخیری، کوچکتر، پیشرفته و بزرگتر می باشند که به شکل زیر تعریف می شوند:

$$G_{l,l'}^{R}(t,t') = \Theta(t-t')[G_{l,l'}^{>}(t,t') - G_{l,l'}^{<}(t,t')]$$
(6)

$$G_{l,l'}^{<}(t,t') = i \langle c_{l'}^{\dagger}(t')c_{l}(t) \rangle$$
(7)  
*e* refrest view of the set of

$$G^{R}(t,\omega) = G^{0}(\omega) +$$
  

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{-ik\Omega_{0}} G^{R}(t,\omega + k\Omega_{0})V(k)G^{0}(\omega) + \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{-ik\Omega_{0}} G^{R}(t,\omega + k\Omega_{0})\Sigma(k,\omega)G^{0}(\omega)$$
(9)



در این مقاله بر مولفه dc جریان متمرکز شده است که به وسیله  
رابطه زیر تعریف می شود:  
$$I_{\alpha} = \frac{1}{\tau_{\alpha}} \int_{0}^{\tau_{0}} dt J_{\alpha}(t)$$
 (11)

# ترابرد و پمپاژ کوانتومی بار و اسپین در نانو نوار گرافینی زیگزاگ

در این مقاله یک طرح موثر برای پمپ اسپینی بر پایه نانو نوار گرافینی زیگزاگ با پهناهای مختلف به وسیله اعمال دو میدان وابسته به زمان در دو طرف سامانه و در حضور میدان تبادلی که از دو طرف بر الکترودها اعمال گردیده، پیشنهاد شده است. در این پژوهش دو پتانسیل وابسته به زمان که دارای شدت دامنه پتانسیل و فرکانس یکسان بوده اما دارای اختلاف فاز  $\frac{\pi}{2}$  می باشند به دو طرف سیستم اعمال کرده و سد پتانسیل را در نقاط اتصالی الکترود به سیستم برای تقویت و تداخلهای بیشتر جریانهای پمپ شده از دو طرف سیستم در نظر گرفته شده است. بر روی الکترودهای متصل به کانال مرکزی یک میدان تبادلی که باعث جداسازی جریانهای اسپینی میشود اعمال شده است.



شکل (۱): طرح توصیفی از پمپ جریان اسپینی از نانو نوار گرافینی. مدولاسیون دو پتانسیل نوسانی وابسته به زمان در دو طرف راست و چپ کانال رسانش (سیستم مرکزی) می تواند جریان پمپ شده ای را در سیستم القا کند. یک زیر لایه فرومغناطیسی بر الکترودها و یک لایه عایق نازک در نواحی پتانسیل وابسته به زمان جهت جلوگیری از کاهش جریان، لایه نشانی شده است.

طرح پیشنهادی مطابق شکل **1** بر پایه نوار گرافینی زیگزاگ در امتداد محور X و دو پتانسیل غیر هم فاز متناوب زمانی با دامنه پتانسیل یکسان که بر روی تعداد  $N_t$  اتم از دو طرف سامانه اعمال شده و سامانه را از حالت تعادل خارج می کند در نظر گرفته شده است. ابعاد نوار با پهنای  $W = N_y$  (W تعداد زنجیره های اتمی می باشد.) و به طول  $X_y = N(X)$  تعداد اتمها در یک زنجیره میباشد.) که از روابط 0 (3/2) $N_y = 1$  (3/2) $N_y = N_y$  و  $N_x = N_y$  که از روابط فاصله بین اتمی می آیند. در این روابط فاصله بین اتمی  $n_0$  می باشد.)

در این پژوهش طول، تعداد اتمهایی که تحت تاثیر پتانسیل وابسته به زمان قرار می گیرد به ترتیب 40 =  $N_x$ ,  $\delta = 4$  است. همچنین پارامتر انرژی جهش الکترون را به صورت 1 =  $N_h$  به عنوان واحد انرژی بهنجار نموده ایم. جهت جداسازی جریانهای اسپینی بالا و پایین شدت میدان تبادلی را =  $0.2t_h$  بهتر برای اسپینی بالا و پایین شدت میدان تبادلی را =  $0.2t_h$  بهتر برای جداسازی جریانهای اسپینی بالا و پایین شدت میدان تبادلی را تعادل بهتر برای معاه مین ای امتر این شدت میدان تبادلی را =  $0.2t_h$  می و به منظور پراکندگی بیشتر و تداخل بهتر برای مسامانه  $\frac{\pi}{2} = \delta$  در نظر گرفته شده است. همچنین بزرگی سد پتانسیل مسامانه  $\frac{\pi}{2} = \delta$  در نظر گرفته شده است. همچنین بزرگی سد پتانسیل و بسته به زمان و فرکانس نوسانی که به دو طرف سیستم اعمال شده به ترتیب و فرکانس نوسانی که به دو طرف سیستم اعمال شده به ترتیب و فرکانس نوسانی که به دو طرف سیستم اعمال شده به ترتیب و فرکانس نوسانی که به دو طرف سیستم اعمال شده به ترتیب و فرکانس نوسانی که به دو طرف سیستم اعمال شده به ترتیب و فرکانس نوسانی که به دو طرف سیستم اعمال شده به ترتیب و فرکانس نوسانی که به دو طرف سیستم اعمال شده به ترتیب و فرکانس نوسانی که به دو طرف سیستم اعمال شده به ترتیب و فرکانس نوسانی که به دو طرف سیستم اعمال شده به ترتیب و فرکانس نوسانی که به دو طرف سیستم اعمال شده به ترتیب و فرکانس نوسانی که به دو طرف سیستم اعمال شده به ترتیب و می آن را ذکر کرده باشیم. در ضمن تمام نمودارهایی که جریان بر حسب انرژی فرمی نمی باشد، انرژی فرمی صفر در نظر گرفته شده است.

#### بررسي نتايج

در این بخش جریانهای پمپ شده اسپینی و اثر پهنا بر شدت جریانهای پمپ شده مورد مطالعه قرار میگیرد. به منظور بررسی جریانهای وابسته به اسپین، میدان تبادلی را بر روی

. الکترودها اعمال کرده و نمودار جریانهای اسپینی بر حسب انرژی فرمی در شکل 2 رسم شده است. همانطور که در این نمودار دیده میشود حضور میدان تبادلی باعث از بین رفتن تبهگنی اسپینی




شکل2: جریان های اسپینی  $I_{\uparrow,\downarrow}$  پمپ شده در نوار گرافینی زیگزاگ  $N_y = N_y$  بر حسب انرژی فرمی به ازای پهناهای متفاوت زوج و فرد  $N_y = 4, 5, 6, 7$ 

استفاده و توجه به این ویژگیهای نانو نوارهای گرافینی زیگزاگ در ساخت و طراحی ابزار و ادوات الکترونیکی و اسپینترونیکی ضروری و مفید میباشد.

## نتیجه گیری:

محاسبات انجام شده در این پژوهش نشان دهنده این واقعیت است که، در نوارهای ZGNR علیرغم شدت جریانهای اسپینی پمپ شده نسبتا قوی در نوارهای با تعداد ردیفهای زوج، اما در نوارهای با تعداد ردیفهای فرد جداسازی جریانهای اسپینی بالا و پایین بسیار قویتر بوده و در نتیجه جریانهای اسپینی قابل ملاحظه ای را در این نوع از نوارهای ZGNR میتوان تولید نمود و برای طراحی ابزار آلات وابسته به اسپین و تکنولوژی اسپینترونیک که قابلیت تولید جریان پلاریزه اسپینی و جریان خالص اسپینی را در نوارهای ZGNR داشته باشند، نوارهایی با پهنای تعداد زنجیره های فرد مناسبتر بوده و دارای ارجحیت می باشد.

مرجعها

الکترونها میشود. میزان جداسازی جریانهای اسپینی بالا و پایین در نوارهای با پهنای زوج و فرد بسیار قوی می باشد و با افزایش انرژی فرمی این جداسازی بیشتر هم میشود.

جریان های اسپینی جدا شده  $I_{\uparrow,\downarrow}$  نشان میدهند، جدا سازی جریانهای اسپینی بالا و پایین در نوارهای با پهنای فرد قابل ملاحظه و به طور کامل می باشد به طوریکه به ازای تمامی مقادیر انرژی فرمی  $0 = \downarrow I$  بوده و جریان الکترونی اسپین پایین صفر گردیده و قطبیدگی مثبت را سبب شده است و این باعث میشود جریانهای اسپینی خالص قابل توجهی به دست آید. لازم به توضیح می باشد که با توجه به شکل(2)، جریان الکترونی اسپین پایین به ازای عرضهای با پهنای فرد 7, 5, حول و حفر گردیده است و از آنجاییکه که نتیجه مربوط به عرض S = v کاملا منطبق بر نتیجه مربوط به عرض 7 =  $v_N$  میباشد قابل رویت نمی باشد.

از سوی دیگر اشاره به این نکته ضروری است که نوارهایی که پهنای آنها با تعداد ردیفهای زوج (Ny = 4,6) می باشد، به لحاظ شدت جریان اسپینی در بیشتر مقادیر انرژی فرمی مشخصا قویتر از جریان پمپ شده در نوارهای با تعداد ردیفهای فرد می باشد. لازم به توضیح است، در نانو نوارهای گرافینی زیگزاگ زوج پهنا یک تقارن دقیق و مسطح در دو طرف نوار دیده میشود و نوع اتمهای کربن لبه های نوار، در لبه های بالایی و لبه های پایینی یکسان می باشد. این مسئله باعث شده در ترابرد باری این نوع نوار با نوارهای گرافینی فرد پهنا،

<sup>[1]</sup> Tim H. Osborn, Amir A. Farajian, Nano Res. 7 (2014) 945.





[<sup>2</sup>] R. Dean Astumian and Peter H"anggi. Brownian motors. *Physics Today*, 55(11):33–39, 2002.

<sup>[3]</sup> Peter H<sup>--</sup>anggi and Fabio Marchesoni. Artificial Brownian motors: Controlling transport on the nanoscale. *Rev. Mod. Phys.*, **81**:387–442, Mar 2009.

- <sup>[4]</sup> L. Arrachea, M. Moskalets, *Phys. Rev. B.* **74**, 245322 (2006).
- <sup>[5]</sup> T.C. Li, and S.-P. Lu, *Phys. Rev. B* 77, 085408 (2008).



# و بررسی rGO/Fe3O4/ZnSe و بررسی rGO/Fe3O4/ZnSe و بررسی کاربرد آن برای تصیفه آب از آلاینده های رنگی فرهمندزاده ، فرزاد' ؛ ملایی، مهدی' ؛ صالحی، سمیرا'

#### چکیدہ

در این پژوهش، نانوکامپوزیت rGO/Fe3O4/ZnSe توسط یک روش رفلاکس سنتز شد. نتایج آنالیزهای XRD و TEM نشان داد که سنتز ساختار rGO/Fe3O4/ZnSe موفق بوده است. نتایج آنالیز VSM نشان داد که نانوکامپوزیت rGO/Fe3O4/ZnSe دارای خاصیت سوپرپارامغناطیس قابل توجهای داشت. فعالیت فوتوکاتالیستی نانوکامپوزیت rGO/Fe3O4/ZnSe با استفاده از آلاینده های رنگی متیل آبی، نتیل نارنجی و رودامین بی مورد بررسی قرار گرفت و نتایج نشان داد تخریب رودامین بی از بقیه آلاینده ها بیشتر بود (% ۲۰۱۳) واژه های کلیدی:rGO/Fe3O4/ZnSe سنتز، تصفیه آب، نانوکامپوزیت

# Synthesis and characterization rGO/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/ZnSe nanocomposites and application for treatment of water from dye pollutants

#### Farahmandzadeh, Farzad<sup>1</sup>; Molaei, Mehdi<sup>1</sup>; Salehi, Samira<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Vali-E-Asr University of Rafsanjan, Rafsanjan

#### Abstract

In this research,  $rGO/Fe_3O_4/ZnSe$  nanocomposite were synthesized by refluxing method. The XRD and TEM results confirmed successful synthesis of  $rGO/Fe_3O_4/ZnSe$  structure. The VSM analyses results showed that  $rGO/Fe_3O_4/ZnSe$  nanocomposite had significant superparamagnetic behavior. Photocatalyst activity of  $rGO/Fe_3O_4/ZnSe$  nanocomposite were studied by using of methylene blue (MB), methylene orange (MO), and rhodamine b (RB) as dye pollutants and results showed that rhodamine b degradation was much superior (91.3%).

*Keywords*: *rGO*/*Fe*<sub>3</sub>*O*<sub>4</sub>/*ZnSe*, *Synthesis*, *Water treatment*, *Nanocomposite* 

PACS No. 91

بهتری نسبت به آن دارد [۳]. Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> نانوذرات تريان معروف از يـكى مغناطيسى خاصىت کے است سوپرپارامغناطیسی به فردی منحصر دارد [۴]. سنتز و رشد Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> بر روی نانوصفحات GO و rGO باعث ایجاد خاصیت مغناطیسی در آنها می شود و این ویژگی باعث راحت جدا شدن این ساختار پس از انجام واکنشهای فوتوكاتاليستى در تصفيه آب مىباشد [۴]. نقاط کوانتومی زینک سلناید (ZnSe) یکی از معروف ترین ساختارهای نیم رسانا گروه II-VI میباشد که خواص ویژه نوری دارد [۵]. سنتز مقاط کوانـتومی ZnSe بر روی گرافـن اکسایـد

#### مقدمه

گرافن اکساید (GO) یکی از ساختارهای کربنی است که ویژگیهای منحصر به فرد الکتریکی، ساختاری و نوری دارد[۱]. گرافن اکساید به دلیل سطح موثر زیاد، رسانایی خوب الکتریکی و ویژگیهای منحصر به فرد ترمودینامیکی در دههای اخیر مورد توجه قرار گرفته است و پژوهشگران زیادی بر روی سنتز، مشخصه یابی و بررسی ویژگیهای آن و ساختارهای متفاوت آن انجام به پژوهش متفاوت آن انجام به پژوهش منده اند[۲]. گرافن اکساید کاهش شده GO می اشد که رسانایی الکتریکی



مغناطیسی باعث ارتقا ویژگیهای نوری به ویژه افزایش فعالیت فوتوکاتالیستی میشود. نانوکامپوزیت rGO/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/ZnSe به دلیل داشتن خاصیت مغناطیسی و خواص نوری منحصر به فرد یک ساختار ایده آل برای بکار رفتن به عنوان کاتالیست برای تصفیه آب از آلاینده های رنگی مانند متیل آبی (MB)، مایل نارنجی (MO) و رودامین

#### سنتز نانوكاميوزيت rGO/Fe₃O₄/ZnSe

در ابتدا گرافن اکساید کاهش یافته مغناطیسی مشابه با روشی که در گذشته برای سنتز کربن فعال مغناطیسی توسط نژادشفیعی و همکاران گزارش شده است، سنتز شدند [۶]. نقاط کوانتومی ZnSe نیز توسط یک روش سریع و آسان فوتوشیمیایی که توسط خفاجه و همکاران گزارش شده است، سنتز شدند [۷]. در نهایت، ۰٬۱ گرم از گرافن مغناطیسی درون ۳۰ میلی لیتر آب دیونیزه یراکنده شد. ۱۰۰ میلی لیتر از نقاط کوانتومی ZnSe نیز پس از رسوب گیری درون ۲۰ میلی لیتر آب دیونیزه پراکنده شدند. در انتها، پس از مخلوط شدن این دو مخلوط، مخلوط نهایی درون بالن تک دهانه قـرار گـرفـت و تـوسط روش رفـلاکس و در دمای ۹۰ درجه سلسیوس به مدت ۲۴ ساعت قرار گرفت. در پایان، نانوكاميوزيت سنتز شده توسط آهن ربا جدا شد و خشک شد.

## نتايج

شکل۱ شنان دهنده آنالیز XRD  $_{g}$  rGO/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>  $_{\epsilon}$  Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> ساختارهای مےباشد. در rGO/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/ZnSe الـگوى شـده ، سنتز نانوكاميزيت يىكھاي مـوجود در زاويـه هـای ۳۰٬۷۳، ۳۵٬۹۹، ۴۳/۸، ۵۳/۹۱، ۵۷/۷۲ و ۴۳/۸ درجه به ترتيب مربوط به صفحات (۲۲۰)، (۳۱۱)، (۴۰۰)، (۵۱۱) و (۴۴۰) ساختار مکعبی Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> میباشد[۴]. وجود پیکھایی در زوایای همينين ۴۵/۵۷ و ۵۱/۷۴ درجه که . 27,07 مربوط به صفحات (۱۱۱)، (۲۲۰) و (۳۱۱) ساختار مکعبی ZnSe مییاشد [۷]،

نشان دهنده رشد موفقیت آمیز ZnSe بر روی گرافن مغناطیسی میباشد.



شکل۱ : الگوی XRD نمونههای متفاوت سنتز شده

VSM آنالىز شکل۲ نـشان دهنده شـد ہ سنتز ساختارهای مےبا شد . همانطور که مشخص است با اضافه شدن ساختارهای غیر مغناطیسی rGO و RGO Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> خاصىت ساختار ىــە سوپرپارامغناطیسی کاهش یافاه است. نانوكاميوزيت سنتز شـد ه ا م\_ا rGO/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/ZnSe خاصيت سويريارامغناطيس قابل توجهای با مغناطیس اشیاه emu/g . ) 1 3 80/8



شکل۲ : آنالیز VSM نمونههای متفاوت سنتز شده

شکل۳ نشان دهنده آنالیز TEM نانوکامپوزیت rGO/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/ZnSe میباشد. در این تصویر ورقههای گرافن اکساید







شکل۵ نشان دهنده طرحواره ساز و کار ممکن برای فعالیت فوتوکاتالیستی نانوکامپوزیتهای rGO/Fe<sub>3</sub>O4/ZnSe با آلاینده رودامین بی میباشد.



شکل۵ : طرحواره سازوکار ممکن فعالیت فوتوکاتالیستی نانوکامپوزیت rGO/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/ZnSe با رودامین بی

با نانوذرات گرد ZnSe و Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> قابل مشاهده است.



شکل۳ : آنالیز TEM نانوکامپوزیت rGO/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/ZnSe

شکل۴ a نشان دهنده تخریب رنگهای متیل آبی، متیل نارنجی و رودامین بے با استفادہ از نانوکامیزیتھای rGO/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/ZnSe مےباشد. همانطور که در این تصویر مشخص است نانوکامیوزیت rGO/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/ZnSe فعاليت فوتوكاتاليستى خیلی خوبی دارد و از میان نمونهها تخريب آلاينده رودامين بی از همه است و در حدود ۹۱٬۳% از این بيشتر از ۴۰ دقیقه تابش نور آلاینده پس فرابنفش از بین رفته شكل۴ b است. اثر نقاط بررسی دهنده نـشان ZnSe کوانتومی فعاليت د ر بــا فوتوكاتاليستى rGO/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/ZnSe رودامین ب میباشد. همانطور که مشخص است سنتز نقاط کوانتومی ZnSe بر روی گرافن اکساید مغناطیسی باعث افزایش جشم گیر فعالیت فوتوکاتالیستی این ساختار شده است که دلیل آن تحریک الكترون هاى نقاط ظرفيت نوار کوانتومے، در اثر تابش نورفرابنفش و انتقال آنها به درون فرايند تخريب مےبا شد .



# نتيجه گيرى

نانوکامپوزیتھای rGO/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/ZnSe تـوسط يـک روش رفـلاکس سنتز شدنـد. آنالیزهای VSM ،XRD و TEM برای بررسی ویژگیهای ساختاری و ریخت شناسی نانوکامپزیتھای rGO/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/ZnSe مورد استفاده قرار گرفت. نتایج فعالیت فوتوکاتالیستی نشان داد که نانوکامیوزیتهای rGO/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/ZnSe دارای قدرت تخریت مناسبی در بازه زمانی خوبی برای آلاینده های رنگی میباشندو داشتن خاصيت دليل بـه همينين قابل ر احتی سويريارامغناطيس به جداشدن از محیط را پس از انجام فرايند تخريب دارند. نتايج به دست آمده از این پژوهش نشان داد که نانوکامیوزیت ها یrGO/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/ZnSe گزینه مـناسبی بـرای استفـاده در تصفـیه آب و فاضلاب مےباشند.

## مرجعها

[1] [1] Priyadarsini, Subhashree, Swaraj Mohanty, Sumit Mukherjee, Srirupa Basu, and Monalisa Mishra. "Graphene and graphene oxide as nanomaterials for medicine and biology application." *Journal of Nanostructure in Chemistry* **8**, no. 2 (2018): 123-137.

[2] Liu, Jihong, Siyu Bao, and Xinzhe Wang. "Applications of Graphene-Based Materials in Sensors: A Review." *Micromachines* **13**, no. 2 (2022): 184.

[3] Yang, Ying, Qiao Liu, Xing-Pei Liu, Ping-Zhen Liu, Chang-Jie Mao, He-Lin Niu, Bao-Kang Jin, and Sheng-Yi Zhang. "Multifunctional reduced graphene oxide (RGO)/Fe3O4/CdSe nanocomposite for electrochemiluminescence immunosensor." *Electrochimica Acta* **190** (2016): 948-955.

[4] Ghazanfari, Mohammad Reza, Mehrdad Kashefi, Seyyedeh Fatemeh Shams, and Mahmoud Reza Jaafari. "Perspective of Fe3O4 nanoparticles role in biomedical applications." *Biochemistry research international* 2016 (2016).

[5] Toufanian, Reyhaneh, Xingjian Zhong, Joshua C. Kays, Alexander M. Saeboe, and Allison M. Dennis. "Correlating ZnSe Quantum Dot Absorption with Particle Size and Concentration." *Chemistry of Materials* **33**, no. 18 (2021): 7527-7536.

[6] Nejadshafiee, Vajihe, and Mohammad Reza Islami. "Adsorption capacity of heavy metal ions using sultone-modified magnetic activated carbon as a bio-adsorbent." *Materials Science and Engineering: C* 101 (2019): 42-52.

[7] Khafajeh, R., M. Molaei, and M. Karimipour. "Synthesis of ZnSe and ZnSe: Cu quantum dots by a room temperature photochemical (UV $\square$ assisted) approach using Na2SeO3 as Se source and investigating optical properties." *Luminescence* **32**, no. 4 (2017): 581-587.





# بررسی خواص الکترونی و ترابردی سامانه- الکترود/پلیمر- پلی استیلن/الکترود

#### ابراهیمی پور،زهرا

دانشکاده علوم پایه،دانشگاه فردوسی مشها.

چکیدہ

در این پژوهش به منظور بررسی خواص الکترونی سیم مولکولی پلی استیلن ترانس با تغییر طول زنجیـره ی آن در چـارچوب مـدل هـای محاسـبات عـددی ، بسـته محاسـباتی کوانتوم اسپرسو بکار رفته است ، و تغییراتی که در خواص رسانایی سیم مولکولی ایجاد می شود، بوسیله بسته محاسـباتی اسـمیگل بررسـی شـده اسـت. محاسـبات حالـت هـای الکترونی نشان می دهد که ساختار نوارهای انرژی الکترونی با افزایش طول زنجیره پلی استیلن به سطح فرمی نزدیکتر شده اند و محاسبات ترابردی نیز بیـانگر آن اسـت کـه پلـی استیلن خاصیت رسانایی الکتریکی از خود نشان می دهد و با افزایش طول زنجیره پلی استیلن به سلح فرمی نزدیکتر شده اند و محاسبات ترابردی نیز بیـانگر آن اسـت کـه پلـی

واژه های کلیدی: بلی استیلن،خواص الکترونی،رسانایی الکتریکی

## Numerical study of the electronic and transport properties of the system -electrode/polymer t-PA/electrode

Ebrahimipour ,Zahra

Faculty of Science, Ferdowsi University of Mashhad

#### Abstract

In this research, in order to investigate the electronic properties of the trans polyacetylene molecular wire by changing its chain length in the framework of numerical calculation models, the Quantum Espresso calculation package has been used, and the changes that are made in the conductivity properties of the molecular wire, by the calculation package SMEAGOL has been checke. Calculations of electronic states show that the structure of electron energy bands have become closer to the Fermi level with the increase in the length of the polyacetylene chain, and the transfer calculations also indicate that polyacetylene exhibits electrical conductivity properties, and with the increase in the length of the polyacetylene chain, current electric decreases.

Keyword: Poly acetylene, electronic properties, electrical conductivity

مقدمه

پلیمرهای رسانا ، مواد آلی پلیمری هستند که همانند فلزات و نیمرساناها ، قابلیت هدایت الکتریکی دارند. این مواد بسیار سبک

در حال حاضر مهمترین قطعات الکترونیکی که از مولکول ها ساخته شده ، دیودها و ترانزیستورهای مولکولی هستند.

بوده ونیز فرایند آماده سازی آن ها در مقاسیه با فناوری سیلیکونی ، ساده تر است.برخلاف فلزات، تغییر شکل بسیاری از پلیمرها ، برگشت پذیر است و به راحتی نمی شکنند. هدف ما مطالعه نظری خواص الکترونی رشته پلیمری پلی استیلن (ترانس) در چارچوب روش های محاسباتی می باشد. با بهره گیری از نظریه تابعی چگالی و استفاده از رهیافت کوهن – شم به توصیف تک ذره ای از سیستم های بس ذره ای می پردازیم. [او ۲] در این پژوهش برای محاسبه نوار انرژی و چگالی حالت ها از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو استفاده شده است ، و برای مطاله خواص ترابردی از بسته محاسباتی اسمیگل استفاده شده است ، رویکرد مورد نظر بررسی خواص الکترونی و ترابردی از سیم مولکولی پلی استیلن می باشد.

## محاسبات

.بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو، یک نرم افزار چند منظوره برای محاسبات ابتدا به ساکن در دستگاه ماده چگال که بر پایه ی نظریه ی تابعی چگالی کار می کند، می باشد. این نرم افزار محاسباتی برای انجام محاسبه، از توابع موج تخت(pw) به همراه شبه پتانسیلی که متناسب با پایه های غیر جایگزیده است، استفاده می کند[۳].

اساس محاسبه ترابرد الکترونی در برخی بسته های محاسباتی از جمله کد اسمیگل تابع گرین غیرتعادلی است.برای استفاده از تابع گرین غیر تعادلی در کد اسمیگل، نیاز به استفاده از کد DFT ای است که هامیلتونی، شکل بستگی قوی دارد، و متناسب با اوربیتال های جایگزیده می باشد.

محاسبات ساختار نواری و چگالی حالت های پلی استیلن:

ابتدا با استفاده از محاسبات اصول اولیه در چارچوب نظریه تـابعی چگـالی و بـا اسـتفاده از كـد pwscf از بسته محاسباتی نرم افزار كوانتوم اسپرسو، ساختار الكترونی را محاسبه مـی كنـیم.

می دانیم که پلی استیلن ساختار شبه دو بعدی دارد و در شبکه محاسباتی ارتورومبیک قرار میگیرد. که در هر سلول واحد سیم مولکولی قرار داده می شود ، و مینیمم انرژی کل بعد از واهلش (relax) دادن ساختار برای پلی استیلن ۸ اتمی RV ۸۵۷۵ /۰۱ – و برای پلی استیلن ۱۲ اتمی ۲۷/۵۲۹۲۶ بدست آمده اند. برای جلوگیری از برهمکنش بین صفحات ، فاصله ی بین آنها را ۱۰ آنگستروم از اخرین اتم قراردادیم.



شکل۱ : پلی استیلن ۸ اتمی و پلی استیلن ۱۲ اتمی











شکل۳: چگالی حالت های جزئی پلی استیلن۸ و ۱۲ اتمی(بالا و پایین)

چگالی حالت های جزئی برای زنجیره های پلی استیلن در شکل (۳) برای ۲٫ دومین اتم کربن از سمت چپ ، رسم شده است. و نشان می دهد که بیشترین تاثیر روی چگالی حالت ها برای نوار های ظرفیت و رسانش ناشی از اوربیتال های *p* می باشد، نمودارهای رسم شده تطابق خوبی با کارهای دیگران دارد[٥].

# محاسبات جريان-ولتاژ:

برای انجام محاسبات ترابردی از نرم افزار محاسباتی اسمیگل استفاده شده است. ابتدا فایل های ورودی مربوط به سیم طلا را در غالب fdf محاسبه می نماییم و از نتایج حاصل از ان بهره می بریم ، سپس فایل ورودی قسمت مرکزی یعنی پلی استیلن در غالب fdf و شبه پتانسیل با پسوند Psf را بکار میبریم.





**شکل ٤** : پلی استیلن ٨ و ١٢ اتمی، بین سیم طلا (بالا و پایین)

اگر ولتاژ بایاس به سامانه اعمال شود، افزایش ولتاژ بایاس، دریچه انرژی (µ<sub>L</sub>-µ<sub>R</sub>) را افزایش می دهد و باعث می شود. حالت های تشدیدی جدیدی از مولکول وارد دریچه انرژی الکترود طلا (µ<sub>L</sub>-µ<sub>R</sub>) نمودار نوار انرژی برای سیم مولکولی پلی استیلن به صورت منحنی های نوارهای انرژی نسبتا صاف شبیه خطوط مستقیم ظاهر می شود، با توجه به اینکه این زنجیره محدود در مقیاس نانو می باشد و همپوشانی با سایر زنجیره های پلیمری ندارد، منحنی های چگالی حالت ها به شکل قله دار بوده و نرم تغییر نمی کند. با افزایش اتم ها تعداد اوربیتال های بالای انرژی فرمی تغییری نکرده ولی تعداد تراز های ظرفیت افزایش پیدا کرده است. و طبق اثر پایرلز ناپایداری ساختار پلی استیلن بین پیوندهای یگانه و دوگانه باعث می شود الکترون ها ازادی عمل بیشتری داشته باشند[٤]، و ضمن وجود گاف انرژی وعدم حضور اوربیتال های مولکولی و چگالی حالت ها در تراز فرمی، سبب تبدیل سامانه به نیم رسانا می شود.



# شود. و باعث ایجاد حالت صعودی در نمودار جریان- ولتاژ می شود. که **نتیجه گیری**





شکل٥ : نمودار جریان – ولتاژ براي پلي استيلن٨ و ١٢ اتمي





شکل٦: نمودار جریان- ولتاژ با افزایش طول پلي استیلن

در این پژوهش به بررسی خواص الکترونی و هدایت الکتریکی زنجیره پلی استیلن پرداخته شده است. از محاسبات بدست می آید که گاف انرژی در سیم مولکولی پلی استیلن با افزایش طول کاهش می یابد، و در زنجیره بی نهایت به حدود ۲۷۷ می رسد ، که نشان دهنده نیم رسانا بودن زنجیره پلی استیلن است. از محاسبات جریان ولتاژ بدست می آید که هدایت الکتریکی در سیم مولکولی پلی استیلن نشانگر خواص رسانایی آن میباشد و جریان با افزایش طول سیم مولکولی پلی استیلن کاهش می یابد.

سپاسگزاری

از جناب اقای دکتر شاه طهماسبی بابت راهنمایی های ایشان صمیمانه سپاسگزارم.

مرجع ها

[1] Hohenberg, P, Kohn, W, (1915), "Inhomogeneous Electron Gas", physical Review Letters, Vol. 177, PP. A15-AV1.

[۲] Kohn, W, sham, L. J, (۱۹۲۵), "self-consistent Equations Including Exchange and correlation Effects", Physical Review Letters, Vol. ۱٤۰, PP. ۱۱۳۳-۱۱۳۸.

[r] Giannozzi, P, Andreussi, O, Brumme, T, Bunau, O, Nardelli, M.B, Calandra, M,Car, R, Cavazzoni, C, Ceresoli, D., Cococcioni, M, Colonna, N, (r, r), *Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO*, Journal of Physics:Condensed Matter, Vol. r, PP. trogram tropped to the strong to the strong

[5] J. A. Pople and S. H. Walmsley, "Bond alternation defects in long polyene molecules", Mol. Phys. (1917)

 $[\circ]$  D. Nwabunma and T. Kyu, Polyolefin Composites . Book.  ${}^{\varsigma} \cdots {}^{\varsigma}.$ 

[7] M. A. Reed, C. Zhou, C. J. Muller, T. P. Burgin, and J. M.

Tour, Conductance of a molecular junction, Science Vol. **\***V^, (**\*§**\*V). [<sup>V</sup>] First-Principles Calculation of Transport Properties of a Molecular Device , VOLUME ^<sup>±</sup>, NUMBER ° PHYSICAL REVIEW LETTERS <sup>\*</sup>' JANUARY <sup>\*</sup>···



# $g-C_3N_4/Fe_3O_4$ ساخت و بررسی ویژگی های ساختاری و نوری نمونه $g-C_3N_4$ و نانو کامپوزیت

ضیاالملکی ، سحر<sup>۱</sup>؛ اصلی بیکی، باقر<sup>۱</sup> ؛ زارعی، محمود<sup>۲</sup>

<sup>ا</sup>دانشکده فیزیک دانشگاه تبریز ، تبریز ۲ دانشکده شیمی، دانشگاه تبریز، تبریز

## چکیدہ

در این تحقیق نانوکامپوزیت B-C3N4/Fe3O4 فرآوری و ویژگی های آن با نمونه ی حجمی B-C3N4 (نیترید کربن گرافیتی) مقایسه گردید. بدین منظور به بررسی ویژگیهای ساختاری ، نوری و رفتار مغناطیسی این دو نمونه توسط دستگاه های میکروسکوپ الکترونی روبشی، پراش پرتو ایکس ، طیف نور تابناکی ، طیف مرئی-ماورابنفش و تحلیل مغناطیس سنج نمونه ارتعاشی پرداخته شد. نتایج حاصل نشان میدهند که نانو کامپوزیت مغناطیسی B-C3N4/Fe3O4 خصوصیات بهبود یافته تری نسبت به نمونه B-C3N4/Fe3O4 دارد. مقدار شکاف انرژی برای نمونه نانوکامپوزیت نسبت به نمونه راست و این موضوع بیانگر فعالیت بالاتر کامپوزیت تحت نور مرئی می باشد.

واژه های کلیدی: ویژگی ساختاری، ویژگی نوری، نانوکامپوزیت.

## Fabrication and study of structural and optical properties of g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>

### and g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> nanocomposite

Ziamolki, Sahar<sup>1</sup>; Aslibeiki, Bagher<sup>1</sup>; Zarei, Mahmoud<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, University of Tabriz, Tabriz <sup>2</sup> Department of Chemistry, University of Tabriz, Tabriz

#### Abstract

In this study,  $g-C_3N_4/Fe_3O_4$  nanocomposite was prepared and its properties were compared with  $g-C_3N_4$  (graphitic carbon nitride) sample. To do this, we investigate the structural, optical and magnetic properties of samples using, scanning electron microscope, X-ray diffraction devices, photoluminescence and Ultraviolet-visible spectroscopy and vibrating sample magnetometer. The results show that  $g-C_3N_4/Fe_3O_4$  nanocomposite has improved properties than  $g-C_3N_4$ . The value of the energy gap for the nanocomposite sample is lower than the bulk sample and this indicates the higher activity of the composite under visible light.

Keywords: Structural properties, Optical properties, Nanocomposite

PACS No. 70

توجه قرار گرفته است[۱]. از این رو نیاز به ساخت کاتالیستهای متفاوت مانند نانو کامپوزیتها افزایش یافته است. یکی از موادی که بسیار مورد توجه در صنعت فوتوکاتالیست است نیترید کربن گرافیتی (g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>)، با شکاف باند متوسط(۲/۷eV)، پایداری

با توجه به نیاز روزافزون به منابع آبی سالم، رفع آلودگی آب و هوا و کمتر شدن خسارت های جبران ناپذیر به این میراث با ارزش، تصفیه آبهای آلوده (آبهای سطحی، آب آشامیدنی،) بسیار مورد

مقدمه



شیمیایی و حرارتی بالا میباشد. با این حال، عملکرد آن به دلیل جذب ناکافی نورمرئی، رسانایی الکترونیکی کم و نرخ نوترکیبی بالای جفتهای الکترون-حفره تولید شده هنوز رضایتبخش نیست. اصلاح g-C<sub>3</sub>N4 می تواند بر این مشکلات برای بهبود خواص فوتوكاتاليستى غلبه كند. در ميان راهبردهاى مختلف اصلاح، ساخت کامپوزیتها یک راهکار ساده برای تنظیم ساختار الكترونيكي و تسريع عملكرد فوتوكاتاليستي است[٢]. اخيرا نانوذرات مغناطیسی (Fe<sub>3</sub>O4) به دلیل داشتن آهن که چهارمین عنصر فراوان در پوسته زمین است و داشتن مزایایی همچون ارزان بودن و خاصیت مغناطیسی به عنوان جاذب و کاتالیست در واکنش-های تخریبی در حال افزایش است. یکی دیگر از مزایای کار با نانوذرات مغناطیسی آهن جدا کردن آسان آنها از محیط واکنش توسط یک آهنربای خارجی است [۳]. تهیه نانو کامپوزیتهای مختلفی از قبیل g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> می تواند در کاربردهای نام برده مفید باشد، زیرا موجب تقویت ویژگیهای ساختاری و نوری گردیده است[٤]. برای تهیه g-C<sub>3</sub>N4 می توان ملامین، تیوره یا اوره به طور جداگانه در یک بوته آلومینا با درپوش قرار داد و سپس تا دمای ۵۵۰ درجه سانتیگراد در کوره مافل گرم کرد. پس از تکلیس، جامد زرد رنگ بدست آمده، آسیاب و جمع آوری گردد. نتایج تحقيقات نشان مي دهد كه كربن نيتريد گرافيتي تهيه شده با ملامين نسبت به اوره و تیوره قله های تیزتری در الگوی پراش پرتو ایکس دارد و ساختار بلوری بهتری نشان میدهد[٥]. به توجه به مطالب بیان شده، در کار پژوهشی حاضر کربن نیترید گرافیتی و نانوکامپوزیت g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/Fe<sub>3</sub>O4 تهیه و ویژگی های آنها با یکدیگر مورد مقايسه قرار گرفت.

#### مواد و روشها

برای تهیه کربن نیترید گرافیتی، ماده اولیه شامل ملامین (C3H6N6) در دمای C °۰۰۰ به مدت ۳ ساعت حرارت داده شد (شکل ۱). در ادامه برای تهیه نانوکامپوزیت g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/Fe<sub>3</sub>O4 پودر کربن نیترید گرافیتی بدست آمده در حمام اولتراسونیک در آب و اتانول لایه برداری و بعد از آن سوسپانسیون حاصل با سرعت ٤٠٠٠ دور بر دقیقه سانتریفیوژ شد. برای تهیه نانوکامپوزیت مغناطیسی ابتدا نمکهای فلزی مورد نیاز شامل کلریدهای آهن داخل بشر حاوی

آب یون زدایی شده ریخته شد. سپس محلول نمکهای فلزی روی گرم کن قرار داده شد. وقتی دمای محلول به C<sup>o</sup> ۸۰ رسید، کربن نیترید گرافیتی بدست آمده از مرحله قبل به داخل بشر اضافه گردید. بعد از مدت ۱۵ دقیقه محلول سدیم هیدروکسید به عنوان عامل رسوب دهنده به محلول نمکها اضافه گردید. بعد از مدت ۳۰ دقیقه هم زدن، رسوب حاصل چندین بار با آب یون زدایی شده شستشو و سپس پودر به دست آمده توسط آهنربای نئودمیومی قوی جداسازی شد و در دمای اتاق خشک گردید.



شکل۱- کربن نیترید گرافیتی ساخته شده شده از ملامین.

# نتايج و بحث

در این تحقیق به منظور بررسی ویژگیهای سطحی نمونهها تصویربرداری SEM انجام یافت. همانطور که در شکل ۲ قابل مشاهده است؛ تصویر الف نمونه حجمی g-C<sub>3</sub>N4 و در تصویر ب به وضوح تثبیت شدن خوشههای نانو ذرات کروی شکل بر صفحه کربن نیترید گرافیتی نشان داده شده است. در واقع صفحات کربن نیترید گرافیتی پایهای برای نگهداری نانو ذرات تامین کرده است و از تجمع آنها جلوگیری میکند. از سوی دیگر وجود نانو ذرات مانع از انباشته شدن و بهم چسبیدن صفحات 4 g-C<sub>3</sub>N4 میشوند.اندازه نانوذرات این کامپوزیت ۲۰/۰۸ نانومتر میباشد.

جهت بررسی ویژگیهای نوری نمونهها از دستگاه PL استفاده گردید. همانطور که در شکل ۳ قابل مشاهده است در طیف لومینسانس نمونهها که دمای اتاق آزمایش شد و در بازه ۳۵۰ تا ۱۰۵۰ نانومتر اندازه گیری شده است، به طور کلی، شدت PL پایین تر نشان دهنده کاهش نرخ نوترکیبی حامل ها است که منجر به





Eg= 2.58 eV 0 2.0 2.5 3.0 3.5 4.0 4.5 5.0 hv(eV)

شکل ٤- محاسبه شکاف انرژی الف)g-C<sub>3</sub>N4 ب)g-C<sub>3</sub>N4/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> ب



500 nm شكل ٢- ريخت شناسي الف) نمونه حجمي g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> ب) نانو كامپوزيت -g

همچنین شکاف انرژی نمونه ها توسط تحلیل طیف سنجی مرئی-فرابنفش بررسی گردید. شکاف انرژی نمونهها با استفاده از برون یابی ناحیه خطی نمودار <sup>2</sup>(Ahv)در مقابل hv محاسبه شد. مقدار Eg طبق شکل ٤ نانو کاميوزيت ۲/۵۸eV) g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> کمتر از ۲/۷۰eV) g-C<sub>3</sub>N4) بوده که نشان دهنده فعالیت بالای آن تحت تابش نور مرئى مىباشد.



شکل ۳– طیف PL کربن نیترید گرافیتی و نانو کامپوزیت PL هیف g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>

فعالیت فوتوکاتالیستی کارآمد می شود. در طیف g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> ،PL به نمایش گذاشته شده یک قله انتشار قوی در حدود ٤٤٣ نانومتر دارد. در مقايسه با قله طيف لومينسانس g-C<sub>3</sub>N4 خالص، قله كاميوزيت g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> به طور قابل توجهی کاهش یافته است. این نتیجه بدان معناست که سرعت به هم پیوستن جفتهای الکترون-حفره در نانو کامیوزیت به مراتب کمتر از نمونه خالص است [7].



C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> توسط ميكروسكوپ الكتروني روبشي.

\_\_\_\_\_ بر الالم. \_\_\_\_\_ بر فریک \_\_\_\_\_

همانطور که در شکل ۲ مشاهده می شود، به منظور مقایسه رفتار مغناطیسی نانو کامپوزیت با نمونه g-C<sub>3</sub>N4 حجمی حاصل از تحلیل VSM استفاده گردید. با توجه به حلقه پسماند نمونه ها مشخص گردید که نمونه g-C<sub>3</sub>N4 دارای رفتار پارامغناطیسی بسیار ضعیف است [۷]. در شکل ۵-ب منحنی پسماند نمونه کامپوزیتی مشاهده می شود که مقدار مغناطش اشباع (Ms) این نمونه g-mu/g بنابراین نانو کامپوزیت Hc) برابر با ۱۸/۳۵ اورستد است. بنابراین نانو کامپوزیت G-C<sub>3</sub>N4/Fe<sub>3</sub>O4 خاصیت مغناطیسی قابل توجهی از خود نشان می دهد بطوریکه می توان با استفاده آهنرباهای دائمی آن را به سرعت از محلول حاوی آن جدا کرد [۸].

نتيجه گيرى

نانوکامپوزیت مغناطیسی g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> با ویژگی های نوری بهبود یافته بطور موفقیت آمیزی ساخته و مورد بررسی و مقایسه با نمونه حجمی نیترید کربن گرافیتی g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> قرار گرفت. نانوذرات فریت آهن روی لایه های ASD-g بطور یکنواخت پخش شدند. با توجه به ویژگی های مغناطیسی و نوری بهبود یافته در این نانوکامپوزیت می توان آن را به عنوان نامزد مناسبی جهت استفاده به عنوان فوتوکاتالیست معرفی نمود.

## مرجعها

[<sup>1</sup>]C. Guo, S. Gao, J. Lv, S. Hou, Y. Zhang, J. Xu, Assessing the photocatalytic transformation of norfloxacin by BiOBr/iron oxides hybrid photocatalyst: kinetics, intermediates, and influencing factors, *Applied Catalysis B: Environmental*, **205** (2017) 68-77.

[ $\Upsilon$ ]J. Wen, J. Xie, X. Chen, X. Li, A review on g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>-based photocatalysts, *Applied surface science*, **391** (2017) 72-123.

[<sup>r</sup>]I. Sirés, E. Brillas, Remediation of water pollution caused by pharmaceutical residues based on electrochemical separation and degradation technologies: *a review*, *Environment international*, **40** (2012) 212-229.

[\*]X. Jia, R. Dai, Y. Sun, H. Song, X. Wu, One-step hydrothermal synthesis of  $Fe_3O_4/g-C_3N_4$  nanocomposites with improved photocatalytic activities, Journal of Materials Science: *Materials in Electronics*, **27** (2016) 3791-3798.

[<sup>Δ</sup>]B. Zhu, P. Xia, W. Ho, J. Yu, Isoelectric point and adsorption activity of porous g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, *Applied Surface Science*, **344** (2015) 188-195.

[ $\uparrow$ ]N. Li, Y. Tian, J. Zhao, J. Zhang, W. Zuo, L. Kong, H. Cui, Z-scheme 2D/3D g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>@ ZnO with enhanced photocatalytic activity for cephalexin oxidation under solar light, *Chemical Engineering Journal*, **352** (2018) 412-422.

[ $^{V}$ ]D. Gao, Y. Liu, P. Liu, M. Si, D. Xue, Atomically thin B doped g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> nanosheets: high-temperature ferromagnetism and calculated half-metallicity, *Scientific reports*, **6** (2016) 1-8.

[ $^]J$ . Yang, H. Chen, J. Gao, T. Yan, F. Zhou, S. Cui, W. Bi, Synthesis of Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> nanocomposites and their application in the photodegradation of 2, 4, 6-trichlorophenol under visible light, *Materials Letters*, **164** (2016) 183-189.



شكل٦- حلقه پسماند مغناطیسی الف)نمونه حجمی g-C<sub>3</sub>N4 ب)نانو کامبوزیت g-C<sub>3</sub>N4/Fe<sub>3</sub>O4

همانطور که در الگوی طیف پراش اشعه ایکس (XRD) شکل ۵ مشاهده می شود دو قله (۱۰۰) و (۲۰۰) به ترتیب در ۱۳/۵= 0درجه و ۲۵/۵= 0 درجه برای کربن نیترید گرافیتی و همچنین ۲0 - ۲۵/۵ و ۲۰/۵ - ۲۵ درجه برای کربن نیترید گرافیتی و همچنین ۲۵ - ۲۵ درجه برای در ۲۰۱۵)، (۲۰۱۵)، (۳۱۱)، ۱۰(۳۱۱)، (۲۰۱۵)، (۲۰۱۵) در ۲۰۱۵ - ۳۵، ۲۰۱۵ ۲۵ - ۲۵ - ۲۵)، (۲۵۱)، (۲۵۱) در ۲۰۱۱ ۲۵ - ۲۵ - ۲۵ و ۲۵/۳۰ - ۲۵ درجه برای فریت آهن می باشد ؛ که نشان دهنده این است که تمامی فازهای مربوطه با موفقیت تشکیل شدند و همچنین موقعیت و شدت نسبی قلههای مربوط به الگوی پراش استاندارد با کد مرجع ۲۵۰۰–۰۰۰





# سنتز الیاف کربن به روش الکتروریسی و بررسی خواص ساختاری و مغناطیسی آن شکرانی حویق، رویا<sup>۱</sup>؛ محمودی چناری، حسین<sup>۱</sup>

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه گیلان، رشت، گیلان، ایران

### چکیدہ

در این تحقیق، برای تهیه الیاف کربن ازپیش ماده پلی اکریلونیتریل ( PAN ) و روش الکتروریسی استفاده شد. سپس خواص ریخت شناسی، ساختاری، و مغناطیسی الیاف کربن تهیه شده با استفاده از آنالیزهای میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM)، پراش پرتو ایکس (XRD)، و مغناطیس سنج نمون ه ارتعاشی (VSM) بررسی شد. تصویر SEM الیاف مهرهدار را نشان میدهند به طور تصادفی جهت گیری کرده اند.الگوی XRD تشکیل ساختار لایه ای گرافیتی را تایید میکند. ساختار آمورف به دلیل دمای کم کربونیزه در مقایسه با دمای گرافیتی شدن است. نتایج VSM دو مولفه مغناطیسی و دیامغناطیس و فرومغناطیس ضعیف را همزمان از خود نشان می-دهد.

واژه های کلیدی: الیاف کربن، روش الکتروریسی

# Synthesis of carbon fibers by electrospinning technique and investigation of its structural and magnetic properties

#### Roya, Shokrani Havigh; Mahmoudi Chenari, hossein<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Faculty of Science, University of Guilan, Rasht, Guilan, Iran

#### Abstract

In this research, polyacrylonitrile (PAN) and electrospinning technique were used to prepare carbon fibers. Then, the morphological, structural, and magnetic properties of the prepared carbon fibers were investigated by scanning electron microscope (SEM), X-ray diffraction (XRD), and vibrating sample magnetometer (VSM). SEM image shows randomly oriented beaded fibers. The XRD patterns confirm the formation of a layered graphite-type structure. The VSM results show two components, one is diamagnetic and another is superparamagnetic

Keywords: carbon fibers, electrospinning technique

PACS No. 81 جمله دگرشکلهای بلوری کربن هستند. نانوالیاف کربن، نانولوله کربنی دگرشکلهای توربواستراتیک کربن هستند. نانوالیاف کربنی مواد یک بعدی هستند که خواص منحصربفردی دارند که آنها را برای کاربردهای مختلفی نظیر جذب انتخابی، تقویتکننده پلیمر، کاتالیزورالکتروشیمیایی و ذخیره هیدروژن مناسب می سازد [1-ع]. الیاف کربن طی فرآیند سه مرحلهای الکتروریسی، پایدارسازی و نهایت کربونیزه کردن تولید می شوند.

کربن یکی از عناصر شگفت انگیز طبیعت است که گستره وسیعی از تنوع و کاربرد را به خود اختصاص داده است. داشتن دگرشکلهای متعدد یکی از ویژگیهای خاص این ماده است که هر کدام از آنها خواص منحصر به فرد و متفاوتی را نسبت به دگرشکلهای دیگر کربن داراست. گرافیت، الماس و فولرن از

مقدمه



امروزه اصلی ترین و مهم ترین ماده ی اولیه برای ساخت الیاف کربن، فیبر PAN است. این الیاف استحکام و مدول بالایی دارند و ساختمان الیاف PAN به نحوی است که اجازه می دهد تجزیه حرارتی با سرعت بیش تری انجام شود، بدون این که تغییری در ساختار اولیه یفیبر ایجاد شود. الیاف PAN در مقایسه با مواد اولیه دیگر از میزان کربن بیش تری بهرهمند است، مقدار کربن به دست آمده حدود ۵۵ % وزنی این الیاف است

پایدارسازی در حضور هوا انجام می شود و موجب تغییر ساختار شیمیایی و پایداری حرارتی فیبرها می شود. پس از پایدارسازی اولیه می توان الیاف الکتروریسی شده را جهت تولید فیبر کربن، تحت عملیات حرارتی در دماهای بالاتر قرارداد. عملیات حرارتی مربوط به پایداری فیبرها در محدوده دمایی ۱۸۰ تا C<sup>0</sup>۳۰۰۳ انجام می شود. در طی این مرحله واکنش های حلقه زایی، هیدروژنزدایی، اکسیداسیون، آروماتیسیته و لینک دهی رخ می دهد که می تواند منجر به ساختار نردبانی در زنجیره پلیمری شود [۵ و 7].

در مرحله کربونیزاسیون، الیاف پایدارشده در محدوده دمایی ۲۰۰۰ تا ۲۰۰۰ در محیط خنثی (نیترون، آرگون) برای مدت چند ساعت تحت عملیات حرارتی قرار میگیرد. در طی فرآیند مواد فرار مانند H2O، H2O، OO، NH3، HCN، و دیگر هیدروکربنها از محصول خارج می شوند. کربن باقیمانده در حدود ۵۰ تا ۵۵ درصد است.

در این مقاله الیاف بر پایه کربن، با استفاده از پلیمرهای پلی آکریلونیتریل(PAN) به روش الکتروریسی تهیه میشوند. و خواص مورفولوژی، ساختاری و مغناطیسی این الیاف بررسی می-شوند

# بخش تجربى

برای تهیـــه محلــول پلیمــری مقــدار ۵٫۰۶ پلــی آکریلونیتریل(CH<sub>2</sub>CHCN) در ۱۰mLحلال دی متیـل فـرم آمیـد (DMF) حل شده و محلول به مـدت ۲٤ سـاعت در دمـای اتـاق

توسط همزن مغناطیسی همزده شد تا محلول همگن به دست آید. سپس محلول حاصل به داخل سرنگ پلاستیکی منتقل شده و تحت شرایط ولتاژ ۲۶ کیلوولت و فاصله ۱۸ سانتیمتر و نرخ تغذیه آسم، الکتروریسی میشود. سپس الیاف جمعشده از روی ورقه آلومینیومی جدا شده و در دمای ۲۰۰۰ تحت اتمسفر هوا، با نرخ حرارتی آسم که مدت یک ساعت پایدارسازی شدند. پس از پایدارسازی در دماهای ۲۰۰۰ با نرخ دمایی آسم ۱۰ به مدت یک ساعت تحت گاز نیتروژن کربونیزه شدند.

مورفولوژی الیاف کربن از طریق میکروسکوپ الکترونی روبشی (Stereo Scan 360) مشاهده شد. خصوصیات ساختاری الیاف PAN کربنیزه شده با استفاده از طرح پراش اشعه ایکس (XRD) با استفاده از پراش سنج Philips X'Pert، پرتو ایکس با استفاده از تابش CuKα (طول موج۱۵٤۰۰۹۰۸ ، ) انجام شد. خواص مغناطیسی نمونه ها با استفاده از مغناطیس سنج نمونه ارتعاشی (VSM)، (مغناطیس سنج دقیق کویر MDKB) بررسی شد.

## نتايج

شکل ۱ تصاویر SEM الیاف تهیه شده را نشان میدهد. هیستوگرام توزیع اندازه قطر آنها، توسط نرم افزار Digimizer، تعیین میشود. همان طور که در شکل ۱ مشاهده میکنیم که الیاف کربن، الیاف مهرهدار را نشان میدهند که به دلیل ناپایداری خمشی جت در حال چرخش به طور تصادفی جهت گیری کردهاند. میانگین اندازه قطر الیاف تهیه شده، ۱,۱ میکرومتر است.



شكل١: تصوير SEM الياف كربن تهيه شده





$$L_{c} = \frac{k\lambda}{\beta_{002}\cos\theta_{002}} \tag{(7)}$$

$$L_a = \frac{k\lambda}{\beta_{10}\cos\theta_{10}} \tag{(7)}$$

 $\lambda$  طول موج پرتو ایکس مورد استفاده (۱۵٤, ۰ نانومتر)، ضریب فرم  $\lambda$  طول موج پرتو ایکس مورد استفاده (۱۹٤, ۰ نانومتر)، ضریب فرم K برای Lc و برای La بای ایک است،  $\theta$  زاویه براگ برای بازتاب مربوطه است، و  $\beta$  عرض پیک در نصف شدت بیشینه بر حسب رادیان است. به منظور دستیابی به پارامترهای دقیق قله، از حسب رادیان است. به منظور دستیابی به پارامترهای دقیق قله، از روش برازش منحنی برای پراش اشعه ایکس استفاده شد (شکل روش برازش منحنی برای پراش اشعه ایکس استفاده شد (شکل 3). مقادیر تخمین زده شده 200، La و LC به ترتیب ۱۸۳, ۰،



شکل ۳: طرح پراش پرتو x الیاف کربونیزه شده در درمای C°۸۰۰



شکل ٤: برازش منحنی طرح پراش پرتو X



شكل ٢:توزيع اندازه قطر الياف تهيه شده برای بررسی خواص ساختاری، طرح پراش پرتو ایکس الیاف کربن تهیه شد.در شکل ۳ الگوی XRD الیاف تهیـه شـده در دماهای C°۸۰۰ مشاهده می شود. قله شدید و پهـن در ۲٤° متنـاظر با صفحه (۰۰۲) لایـه گرافیتـی و قلـه ضـعیف در ٤٤ متنـاظر بـا صفحه (۱۰۰) لايه گرافيتی است (JCPDS: 41-1684) [٧]. قله يهن نشان دهنده تشكيل الياف كربن به شكل أمورف هستند. ساختار آمورف به دلیل دمای کم کربونیزه در مقایسه با دمای گرافیتی شدن است. قله اصلی بازتاب براگ (۰۰۲) تکامل یک ساختار گرافیتی توربوستراتیک با لایههای کربن گرافیتی جهتیافته به صورت تصادفی را نشان میدهد، در حالی که قله (۱۰۰) مربوط به اتمهای کربن در همان صفحه است. از معادله شرر برای تخمين اندازه بلوركهاي گرافيتي مانند فاصله بين صفحه اي (La)، ضخامت كريستاليت (Lc) و طول صفحه لايه (dooz) استفاده شد. فاصله d الياف با معادله براگ به صورت زير محاسبه شد:

$$d_{002} = \frac{\lambda}{2\sin\theta} \tag{1}$$

Lc و La با معادله شرر از موقعیت های بیشینه پراش و عرض قله در نصف شدت بیشینه قله های (۰۰۲) و (۱۰۰) به صورت زیر بر آورد شدند [۸]:



# نتيجه گيري

الیاف کربن با استفاده از الیاف PAN الکتروریسی، پایدارسازی و کربنیزه شده در دمای ۲۰۰۵ تهیه شدند. خصوصیات مورفولوژیکی الیاف تهیه شده، با استفاده از تصاویر SEM، الیاف مهرهدار پس از فرآیند کربنیزه در دمای ۲۰۰۵ را نشان میدهد. الگوهای XRD ساختار آمورف الیاف کربن را نشان میدهد. ساختار آمورف به دلیل دمای کم کربونیزه در مقایسه با دمای گرافیتی شدن است. خواص مغناطیسی الیاف کربن با استفاده از XD مورد آزمایش قرار گرفت و فیبر کربن دو مولفه مغناطیسی دیامغناطیس و فرومغناطیس ضعیف را همزمان از خود نشان می-دهد.

مرجعها

[1] E. Hammel, X. Tang, M. Trampert, T. Schmitt, K. Mauthner, A. Eder, P. Potschke, , *"Carbon nanofibers for composite applications"*, *Carbon*, **42**, No. 5 (2004) 1153–1158.

[2] K. Wang, Y. Wang, Y. Wang, E. Hosono, H. S. Zhou, "Mesoporous carbon nanofibers for supercapacitor application", J. Phys. Chem C, 113, No. 3 (2009) 1093–1097.

[3] B. Zhang, F. Y. Kang, J. M. Tarascon, J. K. Kim, "Recent advances in electrospun carbon nanofibers and their application in electrochemical energy storage", Progress Mater. Sci, **76** (2016) 319–380.

[4] J. C. Ruiz-Cornejo, D. Sebastian, M. J. Lazaro, "Synthesis and applications of carbon nanofibers: a review", Rev. Chem. Eng, **36** (2020) 493–511.

[5] M. C. Paiva, P. Kotasthane, D. D. Edie, A. A. Ogale, "Stabilization route for melt-processible PAN-based carbon fibers", Carbon, **41**, No. 7 (2003) 1399-409.

[6] Z. Bashir, "A critical review of the stabilization of polyacrylonitrile", Carbon, **29**, No. 8 (1991) 1081-1090.

[7]J. Mittal, O. P. Bahl, R.B. Mathur, "Single step carbonization and graphitization of highly stabilized PAN fibers", Carbon, **35** (1997) 1196–1197.

[8] Y. Huang, R. J. Young, "Effect of fiber microstructure upon the modulus of PAN- and pitch-based carbon fibres". Carbon. 33, No. 2 (1995) 97–107.

[9]L. Radjehi, A. Djelloul, M. Bououdina, R. Siab, W. Tebib, "Structural and magnetic properties of copper oxide films deposited by DC magnetron reactive sputtering", Applied Physics A, 124 (2018) 723.

[10]. M. Bououdina, A.A. Dakhel, M. El-Hilo, D.H. Anjum, M. Benali Kanoun, S. Goumri-Said, "Revealing a room temperature ferromagnetism in cadmium oxide nanoparticles: an experimental and first-principles study", RSC Adv. 42, (2015) 33233–33238.

[11]. A.A. Dakhel, M. Bououdina, A. Jaafar, W. Khan, S. Azam, J. Minar, M.B. Kanoun, S. Goumri-Said, "Effect of (Cd, Al) Co-doping and hydrogenation on the long-range ferromagnetic ordering of ZnO: Experimental and DFT studies ", J. Alloy. Compd. (2018).

[12]. S. Azzaza, M. El-Hilo, S. Narayanan, J. Judith Vijaya, M. Bououdina, "Structural, optical and magnetic characterizations of Mn-doped MgO nanoparticles", Mater. Chem. Phys. 143, (2014) 1500–1507.

آنالیز VSM برای بررسی خواص مغناطیسی الیاف کربن استفاده شد. شکل ٥ تغییرات مغناطیسی را به عنوان تابعی از میدان مغناطیسی اعمال شده و تشکیل حلقه پسماند نمونه تهیه شده نشان میدهد. همانطورکه در شکل ٥ مشاهده می شود الیاف کربن دو مولفه مغناطیسی دیامغناطیس و فرومغناطیس ضعیف را همزمان از خود نشان میدهد. ساختار کربنی در حالت کلی بدلیل داشتن رفتار دیامغناطیسی ضعیف در میدانهای مغناطیسی استاتیک خاصیت مغناطیسی نشان نمیدهد. کربن تهیجاهای ٤ الکترون را در پوسته والانس دارد که با ۲ الکترون جفت نشده O2 پر شده است و الکترون آزادی را باقی نمی گذارد و مغناطش در میدانهای بالا در جهت عکس میدان اعمالی خارجی رفتار میکند و رفتار دیامغناطیس غالب می گردد. با این حال نقص های موجود در شبکه فیبرهای کربنی نقش بسیار مهمی را در رفتار مغناطیسی آن ایفا می کنند که می توان به تهی جاهای اکسیژنی و اثرات اندازه کوانتومی آن اشاره کرد. با حذف بخش مربوط به دیامغناطیس، رفتار فرومغناطيس ضعيف مشاهده شده در ساختار الياف كربني مي تواند ناشی ازوجود نقص تهیجاها و اندازه ذرات در مقیاس نانو در ساختار الیاف باشند که منجر به ایجاد و القای ممان مغناطیسی در فيبر می شوند. مشابه رفتار مغناطیسی در بعضی دیگر از مواد دیده شده است[۱۲–۹].



شكل ٥: منحنى پسماند الياف كربن تهيه شده





# بررسی تغییر ولتاژ بر خواص نانوذرات اکسید آلومینیوم –آهن سنتز شده به روش الکترواکسیداسیون محمدزاده ، رضا<sup>1</sup> ؛ موسیوند، صبا<sup>2</sup>

<sup>1</sup>دانش آموخته کارشناسی ارشاد، گروه فیزیک دانشکاده علوم پایه دانشگاه لرستان، خرم آباد، ایران 2دانشیار گروه فیزیک دانشکاده علوم پایه، دانشگاه لرستان، خرم آباد، ایران

چکیدہ

این تحقیق، با هدف ستتز نانوذرات سه فازی اکسید الومینیوم-آهن با روش الکتروکریستالیزاسیون با سه الکترود در یک محلول آبی- آلی انجام گرفت. در این روش برای ساخت نانوذرات از یک سلول الکتروشیمیایی حاوی دو الکترود فلزی از جنس آلومینیوم و آهن به عنوان آند و یک الکترود از جنس آلومینیوم به عنوان کاتد و محلول الکترولیت محتوی تیوره به عنوان پایدارساز و نمک سولفات سدیم به عنوان رساننده الکتریکی استفاده شد. اثر ولتاژ اعمال شده بر سیستم آزمایشگاهی مورد مرحلول الکترولیت محتوی تیوره به عنوان پایدارساز و نمک سولفات سدیم به عنوان کاتد و محلول الکترولیت محتوی تیوره به عنوان پایدارساز و نمک سولفات سدیم به عنوان رساننده الکتریکی استفاده شد. اثر ولتاژ اعمال شده بر سیستم آزمایشگاهی مورد بررسی قرار گرفت. با اعمال ولتاژهای مختلف از 5 ولت تا 25 ولت و گذشت زمان، نانوذرات اکسید آلومینیوم آهن با موفقیت ساخته شدند. از پراش اشعه ایکس (XRD) و میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) مختلف از 5 ولت تا 25 ولت و گذشت زمان، نانوذرات اکسید آلومینیوم آهن با موفقیت ساخته شدند. از پراش اشعه ایکس (XRD) و میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) مختلف از 5 ولت تا 25 ولت تا 25 ولت و گذشت زمان، نانوذرات اکسید آلومینیوم آهن با موفقیت ساخته شدند. از پراش اشعه ایکس (XRD) و میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) استفاده گردید. به منظور بررسی بیشتر (XRD) و میکروسکوپ الکترونی روبشی و التر امای محصل کردند اندازه میانگین نانوذرات تایید گردید. به منظور بررسی بیشتر نانوذرات از آنالیزهای TF-IR میکی شده گردید. نتایج حاصل از SEM مشخص کردند اندازه میانگین نانوذرات با افزایش میلاد و همچنین نتایج حاصل نانوذرات از آنالوذرات با افزایش میلاد. و همچنین نتایج حاصل نانوذرات از کنانو ذرات تشکیل شده در ولتر 5 ولت،نانوذرات سنتر شده در ولتر 5 ولت معنون به میکر کروی با ساختارهگزاگونال به درستی تشکیل شده در ولتای جام کروی با ساختارهگزاگونال به درستی تشکیل شدهاند. و همچنین نتایج حاصل از VSM مشخص شد که نانو ذرات انوزرات با افزای در ولتر 5 ولت به عنوان بهترین نتایج حاصل میکر میخوس م بجز نانو ذرات تشکیل شده در ولتر 5 ولترا 15 ولت دارای بیشترین مغناطش هستند. بنابراین نانوذرات سنتر شده در ولتاژ15 ولت به عنوان بهترین نتایج مالفس میند. بنابراین نانوذرات سنتر شده در ولتاژ15 ولت به عنوان بهترین نانوذرات سنتر شده در ولتا

كليدواژهها: نانوذرات اكسيد آلومينيوم آهن، الكتروكريستاليزاسيون، خواص ساختاري،مغناطش، سه الكترود

### Investigation of voltage change on the properties of aluminum -iron oxide nanoparticles synthesized by electrocrystallization method with three electrodes Mohammadzadeh, Reza<sup>1</sup>; Mosivand<sup>2</sup>, Saba<sup>2</sup>

<sup>1</sup>MSc. Graduate, Department of Physics, Lorestan University, Khorramabad.Iran <sup>2</sup>Associate Professor, Department of Physics Lorestan University, Khorramabad, Iran

#### Abstract

The aim of this study was to synthesize three-phase aluminum-iron oxide nanoparticles by electrocrystallization with three electrodes in an aqueous-organic solution. In this method, an electrochemical cell containing two metal electrodes made of aluminum and iron as anode and an electrode made of aluminum as a cathode and an electrolyte containing thiourea as a stabilizer and sodium sulfate salt as an electrical conductor were used to make nanoparticles. The effect of applied voltage on the laboratory system was investigated. Aluminum-iron oxide nanoparticles were successfully fabricated by applying different voltages from 5 volts to 25 volts over time. X-ray diffraction (XRD) and scanning electron microscopy (SEM) were used to determine the shape and size of the particles and the crystal structure of the nanoparticles was confirmed. In order to further investigate the nanoparticles, FT-IR, EDX and VSM analyzes were used. Spheres with hexagonal structure are properly formed. The results of VSM also showed that the synthesized nanoparticles at 15 volts were selected as the best nanoparticles.





*Keyword*: Aluminum- iron oxide nanoparticles, electrocrystallization, structural properties, magnetization, three electrodes

هدف رسانندگی الکتریکی استفاده شد. پس از اعمال ولتاژ مناسب به سلول الکتروشیمیایی، در سطح آند واکنش اکسیدی و در سطح کاتد واکنش کاهش آب رخ میدهد. یونهای در محلول الکترولیت با هم وارد واکنش شده و نانوساختارها شکل میگیرند. میتوان گفت اعمال ولتاژ سبب برقراری جریان در سلول میشود. که این جریان معیاری از سرعت و سنیتیک مبادله الکترون و پیشرفت واکنشهای الکترودی است.[8]

# نتايج XRD

با هدف دستیابی به ساختار نمونههای ساخته شده از دستگاه XRD استفاده گردید. در ولتاژ 5 ولت به دلیل پایین بودن ولتاژ مشاهده کردیم که واکنش به کندی پیش میرود و پس از قطع کردن ولتاژ مشاهده شد که ذرات به مقدار بسیار کمی تولید شدهاند. سپس نمونه برای انالیز XRD ارسال شد که شاهد سولفاتسدیم، اکسید الومینیوم-اهن، اکسید اهن و اکسید الومینیوم در نمونه سنتزشده در ولتاژ 5 ولت بودیم.



شكل1 : الگوى پراش اشعه ايكس نمونه سنتز شده در ولتاژ 5 ولت.

مقدمه

فناوری نانو امروزه یکی از مهمترین شاخههای علم می باشد که توجه بسیاری از کشورهای جهان را به خود واداشته است. کاربرد نانو مواد روز به روز در حال افزایش می باشد و به دلیل اهمیت فراوان این شاخه از علم در چند سال اخیر تحقیقات فراوانی در راستای روش های ساخت انها انجام گرفته است که برای تولید نانو ذراتی با کارایی بهتر و در عین حال دارای مکانیزم تولید سادهتر تلاش شده است[1]. از بین روش های مختلف سنتز، روش الکتروکریستالیزاسیون یک روش مناسب به شمار می رود. تاکنون از روش الکتروکریستالیزلسیون با دو الکترود برای ساخت نانو ذرات استفاده شده است اما در این پژوهش برای نخستین بار، با هدف تولید نانو ذرات سه فازی اکسیدآلومینیوم-آهن از روش الکتروکریستالیزاسیون با سه الکترود استفاده گردید.

## روش تجربی

سلول ها دارای دو آند از جنس آهن و آلومینیوم و یک کاتد از جنس الومینیوم بودند. ابتدا دو قطعه از جنس اهن و الومینیوم با ابعاد **2 cm x 2 cm** به عنوان آند و یک قطعه آلومینیوم با ابعاد **2 cm x 4 cm** به عنوان کاتد برش داده شد. و ولتاژ به عنوان متغیر در نظر گرفته شد. برای این هدف 5 سلول با مشخصات بالا ساخته شد تا نانو ذرات را در ولتاژهای متفاوت 5، 10، 15، 20 و 25 ولت سنتز کنیم. الکترولیت شامل آب مقطر، پایدارساز 1/1 مولار تیوره و نمک سولفات سدیم می باشد. به منظور پوشانندگی وجلوگیری از کلوخهای شدن ذرات از تیوره به عنوان

و در نمودار 2 الگوی XRD نمونه های مختلف ساخته شده در ولتاژهای دیگر به همراه اندیس های میلر آنها آورده شده است. مقایسه الگوی پراش XRD در این ولتاژها با الگوی کارت استاندارد (JCPDS-210-900-1479) نشان می دهد که این ذرات دارای ساختار هگزاگونال اکسید آلومینیوم – آهن با فرمول شیمیایی AlFeO<sub>3</sub> میباشند. و در مقایسه با کارت استاندارد (JCPDS-96-900-5842) نشان از تشکیل نانو ذرات هگزاگونال اکسید اهن با فرمول شیمیایی Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> نانو ذرات هگزاگونال اکسید اهن با فرمول شیمیایی JCPDS-90-90-90-نشان از تشکیل نانو ذرات اکسید الومینیوم با فرمول شیمیایی نشان از تشکیل نانو ذرات اکسید الومینیوم با فرمول شیمیایی



شکل2 : الگوی پراش اشعه ایکس مربوط به نمونههای ساخته شده دربازه ولتاژی 10 ولت تا 25 ولت.

## نتايج SEM

با هدف تعیین اندازه نمونههای ساخته شده با ولتاژهای مختلف از نظر شکل و اندازه، نانوذرات سنتز شده در ولتاژهای مختلف با استفاده از میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) مورد بررسی قرار گرفتند.

با بررسی تصاویر بدست آمده مشاهده گردید که اندازه میانگین نانو ذرات تحت تاثیر ولتاژ اعمالی قرار دارد. بجز در

ولتاژ 5 ولت با میانگین اندازه ذرات 281/665nm در بقیه ولتاژها نانو ذرات به درستی سنتز شدهاند. ومشاهده شد با افزایش ولتاژ اندازه میانگین نانو ذرات سیر سعودی دارد. افزایش اندازه نانو ذرات با افزایش ولتاژ را میتوان حاصل از این دانست که بالا رفتن ولتاژ سبب افزایش جنبو جوش در محلول الکترولیت شده و این افزایش تحرک باعث افزایش سرعت جوانهزنی و تعداد برخوردهای بین ذرات میشود و چون ذرات فرصت کافی برای رشد دارند بنابراین اندازه ذرات بزرگتر میشود.



شكل3 : تصاوير SEM نانوذرات سنتز شده در ولتاژ 15 ولت

# نتايج EDX

به منظور بررسی میزان خلوص نانو ذرات تولید شده و اطلاع از عناصر تولید شده از ازمون تجزیه عنصری EDX استفاده گردید. نتایج حاصل از وجود عناصر اکسیژن، الومینیوم، اهن، گوگرد و سدیم را در نمونهها نشان میدهد.



شكل4 : نتايج حاصل از EDX نمونه سنتز شده در ولتاژ 15 ولت.



# نتايج VSM

با هدف بررسی میزان مغناطیده شدن نانو ذرات تولید شده از دستگاه VSM استفاده گردید. نتایج حاصل از انالیز در نمودار زیر آورده شده است.



شكل5 : نمودار VSM نمونههای ساخته شده اكسید الومینیوم-اهن با ولتاژهای مختلف.

همانگونه که مشاهده میکنید مغناطش ابتدا افزایش و سپس کاهش مییابد. به گونهای که نانو ذرات ساخته شده در ولتاژ5 ولت دارای کمترین مقدار مغناطش ودر 15 ولت دارای بیشترین مقدار مغناطش میباشند.

# نتيجه گيرى

در این پژوهش سنتز نانوذرات اکسید آلومینیوم –آهن به روش الکتروکریستالیزاسیون با سه الکترود تحت ولتاژهای مختلف با موفقیت انجام شد. بررسی مورفولوژی و خواص ساختاری نانوذرات تولید شده با کمک دستگاههای پراش پرتو ایکس و میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) و آنالیز (EDX) صورت گرفت. مقایسه نتایج حاصل از انالیز XRD برای ولتاژ 5 ولت نشان میدهد که نانو ذرات ما در این

ولتاژ به درستی تشکیل نشدهاند. اما نتایج حاصل از XRD ولتاژهای V 10، V 15، V 20 و 25 ولت نشان از تشکیل ساختار کریستالی هگزاگونال اکسید آلومینیوم – آهن، اکسید اهن و اکسید الومینیوم را دارندکه در ولتاژ 15ولت، اکسید آلومینیوم – آهن به مقدار بیشتری نسبت به سایر ذرات تشکیل شده است.

تصاویرانالیز SEM گویای آن است که ذرات کروی بوده و در بسیاری از ولتاژها ذرات تقریبا جدا از هم تشکیل شدهاند.

نتایج VSM نشان از مغناطیسی شدن ذرات است. با توجه به انچه که بیان شد نانو ذرات تشکیل شده در ولتاژ15 ولت به عنوان بهترین نمونه انتخاب شدند.

#### مرجعها

 Vaughan, A. S. (2013, June). Nano at nineteen. In Solid Dielectrics (ICSD), 2013 IEEE International Conference on (pp. 706-709).

[2] موسیوند، صبا، (1392). ساخت و مطالعه خواص ساختاری و مغناطیسی نانو ذرات اکسید آهن و بررسی کاربرد آنها. پایان نامه دکتری دانشگاه شهید چمران اهواز.

[3] رجائیان، آزاده. (1389) مقایسه روشهای سنتز نانوذرات اکسید آلومینیوم و مطالعه خواص ساختاری و اپتیکی آن .پایان نامه کارشناسی ارشد دانشگاه دامغان.





# رشد عایق بلوری KBr و بررسی پتانسیل الکتروستاتیک موضعی بر روی گرافن

هاشمی، مريم؛ کاظمی\*، آسيه السادات

دانشکده فیزیک، دانشگاه علم وصنعت ایران، تهران

## چکیدہ

پتاسیم برمید (KBr) عایق یونی تختی است که کاربردهای مختلفی در تولید قطعات الکترونیکی و اپتیکی و ایجاد پتاسیل های موضعی الکتروستاتیک بر روی مواد دو بعدی دارد. تولید این ساختار بلوری به روش های سنتی چکرالسکی و یا جدیدتر مانند برآرایی بسیار هزینه بر است. در اینجا از روش ساده ای مبتنی بر قرص سازی تحت فشار از پودر خالص KBr جهت تولید ساختار بلوری آن استفاده شده است. این قرص ها در دماهای مختلف پخت شدهاند و با نمونه استاندارد KBr مقایسه شدهاند. مطالعات ساختاری و مورفولوژیکی با پراش پرتو ایکس و میکروسکوپ نیروی اتمی در مد تماسی، نشان می دهد ساختار بلوری fcc شکیل شده و افزایش دمای پخت، اثر قابل ملاحظهای بر کاهش ناهمواریهای سطح، کاهش ارتفاع گامهای اتمی و نیز کاهش فاصله بین گامهای اتمی دارد. تحقیقات نشان داده که پتانسیل الکتروستاتیک روی گامهای اتمی از نواحی تخت KBr ، قویتر هستند. گرافن چندلایه از روش لا یه برداری مکانیکی بر روی نمونه KBr با دمای بالاتر، انتقال یافته است و اثر گامهای اتمی از نواحی تخت KBr ، قویتر هستند. گرافن چندلایه از روش لا یه برداری مکانیکی بر روی نمونه KBr با دمای بالاتر، انتقال یافته است و اثر گامهای اتمی از نواحی تخت KBr ، قویتر هستند. گرافن چندلایه از روش لا یه برداری مکانیکی بر روی نمونه KBr با دمای بالاتر، و ازه های کلیدی: میکر مهای اتمی و پتانسیلهای الکتروستاتیک بر روی گرافن بند و ست.

# KBr insulating crystal growth and characterization of local electrostatic potential on graphene

#### Hashemi, Maryam; Kazemi\*, Asieh sadat

Department of Physics, Iran University of Science and Technology, Tehran

#### Abstract

Abstract

KBr is an insulating flat substrate and possess various applications in electronic and optical devices and inducing local strong electrostatic potentials on 2D materials. Fabrication of this crystal via conventional Czochralski method or more novel epitaxial methods is costly. Here, a simple method is employed based on pellet fabrication from KBr powder by applying pressure. These pellets have been baked at various temperatures and compared with standard Agar-KBr. Morphological and structural studies via X-ray diffraction and atomic force microscopy show the formation of fcc structure. Increasing the temperature significantly reduces roughness parameters, the height of the atomic steps and the distance between them. Recent research results demonstrate stronger electrostatic potential on the atomic steps than on the flat regions of KBr surfaces. Few layer graphene have been transferred onto higher temperature KBr surfaces and the effect of electrostatic potential near atomic steps have been investigated on these sheets.

Keywords: KBr, Graphene, Atomic force microscopy, Atomic steps, Electrostatic forces

مقدمه : مقدمه : پتاسیم برمید با فرمول شیمیایی KBr، دارای ساختار بلوری شفاف و یکنواخت و بی رنگ و قابل انحلال در ساختار قطبی آب، طیفسنجی تبدیل فوریه فروسرخ (FTIR) و تقسیم کنندههای



یرتو در اسیکتروفتومترها استفاده می شود. بسترهای KBr نرم و مرطوب هستند و KBr تکبلور شفاف، دارای عبور مادون قرمز بالا و گذر بیش از 90٪ در ضخامت کمتر از mm است و مقاومت خوبی در برابر شوکهای مکانیکی دارد [1]. ساختارهای KBr تکبلوری با عدم وجود عیوب در مقایسه با بسبلورها، خواص منحصر به فرد مکانیکی، نوری و الکتریکی دارند [2] و به روش،هایی شامل چکرالسکی (Czochralski)، منطقه شناور (Floatingzone) و بریجمن (Bridgman) با صرف هزینههای بالا تولید میشوند [3,4]. روشهای دیگر رشد KBr شامل سنتز هیدروترمال و تصعید، تبلور ساده مبتنی بر حلال [1] و برآرایی [5] است. بلور KBr در توليد قطعات الكترونيكي بعنوان عايق الکتریکی و زیرلایه مناسب جهت رشد نانوساختارهای رسانا و نیز در مطالعات میکروسکوپ نیروی اتمی غیر تماسی [7] کاربرد دارد. بعلاوه، بعنوان مبدل نور در ناحیه nm 200–10 فرابنفش و قطعات اشعه X نرم [8]، استفاده می شود. در مطالعات دیگر، با قرار گرفتن این ماده در محیط، از خاصیت تشکیل دو قطبی های آب بر روی تراس های این ماده در مقیاس اتمی، بعنوان منبعی جهت ايجاد پتانسيل الكتروستاتيك استفاده شده است [9]. در اين مطالعه، روش ساده و ارزان مبتنی بر قرص سازی از جامد پودری تحت فشار، جهت توليد KBr تخت، بهكار رفته است. قرص هاي شفاف حاصل، در دماهای مختلف در کوره حرارت دیده و با میکروسکوپ نیروی اتمی بررسی شدهاند. گامهای اتمی از نظر ساختاری، ابعاد، ضخامت و فاصله از یکدیگر روی سطح KBr در دو دما و نیز با KBr استاندارد مقایسه شدهاند. بعد از اسپتروسکوپی نیرو روی گامهای اتمی، گرافن چندلایه روی این ساختار بلوری قرار گرفته و پتانسیل الکتروستاتیک اعمالی بر روی آن بررسی شده است.

### مواد و روش:

پودر KBr با خلوص بسیار بالا خریداری شده (Merck)، در هاون عقیق مخصوص و از قبل تمیز شده، سابیده شد تا بافت یکنواختی پیدا کند. پودر نرم شده به کپسول قرصساز با قطر cm

1 بطور يكنواخت انتقال يافت و در دستگاه پرس تحت فشار l Gpa ساخته شد. سپس، قرصها در بوتههای سرامیکی تمیز و درون کوره جای گرفتند. دمای کوره با گامهای C° 50 افزایش یافت تا به دماهای C° 400 و C° 500 برسد. قرص ها به مدت 1 ساعت، در کوره حرارت دیدند. طی زمان انتظار تا تصویربرداری، اسپکتروسکوپی نیرو و یا انتقال گرافن، قرصها در محیط دسیکاتور تحت خلاء نگهداری شدند تا از جذب رطوبت محیطی جلوگیری شود. این قرصها جهت مشخصهیابی ساختاری با دستگاه پراش پرتو ایکس (Bruker-Advanced) با تابش CuKa با λ =1.5406 Å بررسی شدند. جهت مقایسه مطالعاتی، بلور KBr خریداری شده از شرکت AGAR با شناسه تجاری AGG3900 به کمک تیغ تیز و با زاویه قائم، برش داده شد و سطح (100) أن بلافاصله استفاده شد. تصویربرداری با میکروسکوپ نیروی اتمی (مدل Advanced-آرا پژوهش) در مدهای تماسی و ضربهای و در رطوبت 35-30٪ در دمای محیط انجام شد. گرافن از روش لایهبرداری مکانیکی از HOPG بر روی قرص ساخته شده قرار گرفت و مطالعه شد.

### نتايج و بحث :

شکل 1 طیف پراش پرتو ایکس دو نمونه رشد یافته در دماهای C 400 و C 500 را نشان می دهد. همه قلههای این طیف موید with the output of the output o

تصاویر دوبعدی و سهبعدی توپوگرافی AFM از قرصهای KBr در دو دمای پخت شده و Agar-KBr در شکل 2 نشان میدهد که گامهای اتمی با افزایش دما، به هم نزدیکتر می شوند و ارتفاع آنها کاهش می یابد. با مشاهده دقیق تر لبه گامهای اتمی در ڎٳؿڲٳڋ ڛۑۑڹ ب

> دمای °C 400، مشخص می شود این لبه ها از شاخص های بالاتر ميلر <sup>۱</sup> تشکيل شده اند. با افزايش دما، در C° 500، اين شاخص ها، به شاخصهای پایینتر تقلیل می یابند. Agar-KBr گامهای اتمی بسیار ظریف و با فواصل اتمی بسیار کم داشته و قرص C° 500 به این نمونه بسیار شباهت دارد. برای مطالعه دقیق تر سطح قرص ها و کاهش خطای اندازه گیری، از همه تصاویر شکل 2. ینجرهای با ابعاد 2 × 2 لنتخاب شد و پردازش ناهمواری در با نرم افزار SPIP صورت گرفت (شکل 3). میزان ناهمواری متوسط سطوح یا Sa بهطور مشخص با افزایش دمای پخت بلور، کاهش می یابد. کمیت دیگر استخراج شده از ناهمواری سطح، Sq است که به انحراف معیار توزیع ارتفاع مربوط است. تغییرات این کمیت نیز مانند تغییرات Sa است. مقادیر مربوط به این پارامترها به هم نزدیک است. دو پارامتر رایج دیگر ناهمواری، Sp و Sv هستند که به ترتیب ارتفاع بلندترین قله و عمق عمیقترین دره را در سطح نشان میدهند. اختلاف این دو کمیت، بعنوان پارامتر Sz شناخته می شود. روند تغییرات این پارمترها هم بصورت افزایشی با کاهش دمای پخت است. همه مقادیر ناهمواری در نمونه KBr-Agar از دو نمونه پخت شده کمتر و مقادیر ناهمواری در نمونه ℃ 500 به این نمونه بسیار نزدیکتر است.

> با توجه به مشخصات ساختاری نمونه 2°500 اسپکتروسکوپی نیرو در نواحی دور از گام اتمی و روی گام اتمی در مد تماسی انجام شد. این اندازه گیری در راستای یک خط راست گذرا از یک گام اتمی و با ایندنتیشن nn 1000 کنتیلور بر روی سطح صورت گرفت. مقادیر نیرو با توجه به مقدار ثابت فنر کنتیلور، بر حسب N در نقاط مختلف به فاصله 250 از هم (شکل 4الف و ب)، اندازه گیری شد. مقادیر نیرو در راستای این خط راست در نواحی دور از گام اتمی حدود nN 5 و در نزدیکی گام اتمی نواحی دور از گام اتمی حدود nN 5 و در نزدیکی گام اتمی عایقهای یونی مانند KBr پتانسیل الکتروستاتیک قوی تری نسبت به ناحیه هموار سطح دارند. با قرار دادن گرافن بر روی سطح KBr به ناحیه هموار سطح دارند. با قرار دادن گرافن بر روی سطح KBr

<sup>1</sup>High Index Steps <sup>2</sup>Low Index Steps

و عایق یونی بخصوص در نواحی گامهای اتمی و ناخالصیها یا نقصهای شبکه [9]، قابل بررسی است.



شکل 1: طیف XRD ساختار بلوری قرص های KBr پخت شده در دماهای °C و 30 000 و °C 000 و °C



شکل2 : تصاویر توپوگرافی دوبعدی از سطح قرص های KBr در دماهای C° 400 و C° 500 و نیز Agar-KBr به ابعاد 20µm<sup>2</sup> × 20 در مد تماسی.

با افزایش تعداد لایه های گرافن، اثر این پتانسیل، بیشتر استتار می-شود [11,12]. نقشهبرداری توپوگرافیک و فاز از سطح گرافن در مد ضربهای بر روی گامهای اتمی KBr در شکل 4 (ج و ه) این موضوع را بهتر نشان میدهد. تغییرات پتانسیل روی خود گامهای اتمی KBr با حضور دوقطبی های آب در شکل 4(ه) بهتر مشخص است. نتایج بدست آمده در تطابق با یافته های علمی اخیر است [9,12,13]



شکل3: تغییر پارامترهای مختلف ناهمواری مستخرج از تصاویر سطح قرصهای KBr در دماهای C° 400 و S00 °C و نیز Agar-KBr، به ابعاد 2×2**µm<sup>2</sup>** در مد تماسی.



تصویر دوبعدی توپوگرافی گرافن چندلایه بر روی KBr، تصویر دوبعدی

تغييرات فاز شكل ج، تصوير سەبعدى توپوگرافي شكل ج.

# نتيجه گيري

ساختار بلوری KBr به روش سادهای مبتنی بر قرص سازی تحت فشار تولید شده است. مطالعه ساختاری و مورفولوژیکی بر روی قرص های پخت شده در دماهای مختلف با پراش پرتو ایکس و میکروسکوپ نیروی اتمی، صورت گرفتهاست. افزایش دمای منجر به كاهش ناهموارى هاى مختلف سطحى، كاهش ارتفاع گام-های اتمی و نیز کاهش فاصله بین گامهای اتمی شده است. اسپکتروسکوپی نیرو روی سطح بلوری KBr نشان داده اندازه نیرو روی گامهای اتمی بیشتر از نیرو در نواحی مسطح است. گرافن انتقال یافته بر روی این گامها هم پتانسیل الکتروستاتیک قویتری حس ميكند.

مرجعها [1] KBr Crystal Structure: Datasheet from "PAULING FILE

Multinaries Edition - 2012" in SpringerMaterials,

https://materials.springer.com/isp/crystallographic/docs/sd 17110 16

[2] I. Milisavljevic, I., Y., Current status of solid-state single crystal growth. BMC Mat 2, 2 (2020).

[3] G. Müller, J. Friedrich, Crystal growth, bulk: methods. In: Bassani G, Liedl G, Wyder P, editors. Encyclopedia of condensed matter physics. Oxford: Elsevier Ltd; p. 262-74, (2005).

[4] K. Suan Jen Hseueh Pao, Growth Process of Large Section Crystal of Potassium Bromide, Journal of the Chinese Ceramic Society, 43(1):60-64, 2015.

[5] S. Kato, Y. Takeyama, S. Maruyama, and Y. Matsumoto, Nonfaceted Growth of (111)-Oriented Epitaxial Alkali-Halide Crystals via an Ionic Liquid Flux in a Vacuum, Crystal Growth & Design, 10(8), 2010.

[6] M. Yamauchi, S. Maruyama, N. Ohashi, K. Toyabe and Y. Matsumoto, Epitaxial growth of atomically flat KBr (111) films via a thin film ionic liquid in a vacuum, Cryst. Eng. Comm, 18, 3399, 2016. [7] T. Glatzel, L. Zimmerli, S. Kawai, E. Meyer, L.-A. Fendt and F. Diederich, Oriented growth of porphyrin-based molecular wires on ionic crystals analysed by nc-AFM, Beilstein J. Nanotechnol., 2, 34-39.2011.

[8] R. Rai, Triloki, and B. K. Singh, Photoemission and morphological studies of KBr thin film photocathode for astrophysics application, Proceedings of the DAE-BRNS Symp. on Nucl. Phys. 61 (2016).

[9] G. J Jones, A. Kazemi, S. Crampin, M. Phillips, A. Ilie, Surface Potential Variations in Graphene Induced by Nanostructured Crystalline Ionic Substrates, Applied Physics Express 5 (4), 045103, 2012

[10] Rai, R., Triloki, T. & Singh, B.K. X-ray diffraction line profile analysis of KBr thin films. Appl. Phys. A 122, 774 (2016)

[11] A.S. Kazemi, Engineering wavefunction if graphene systems, PhD Thesis, University of Bath, 2015.

[12] Li, L.H., Tian, T., Cai, Q. et al. Asymmetric electric field screening in van der Waals heterostructures. Nat Commun 9, 1271 (2018).

[13] L.H. Li et al. Electric contributions to magnetic force microscopy response from graphene and MoS2 nanosheets, J. APPL. PHYS. 116, 213904 (2014).





# تأثیرات سد الکتریکی و مغناطیسی بر ترابرد اسپینی در مدل نیمرسانای نامتجانس چند لایه

بهاديوند چگيني،سميرا ؛ شهري ناصري ، محبوبه

دانشکده فیزیک ،دانشگاه پیام نور ،تهران ،ایران

چکیدہ

ما در این مقاله ترابرد اسپینی را در نیمرساناهای مبنی بر ترکیبی از سد الکتریکی و میدان مغناطیسی ناهمگن در گاز الکترونی دو بعدی مورد مطالعه قرار داده ایم.این ساختارها سد دوگانه و سد سه گانه الکتریکی بر روی نیمرسانای نامتجانس می باشد که فلز فرومغناطیس را روی آنها قرار داده ایم. ما با استفاده از تابع آیری ، تقریب جرم موثر و سدهای مغناطیسی تقریب شده توسط تابع دلتا،ضریب عبور الکترون را در تونل زنی الکترون ها و قطبش اسپینی محاسبه کرده ایم.تنایج ما نشان می دهند که ضریب عبورالکترون به پارامترهای ارتفاع و پهنای سد پتانسیل الکتریکی ، بردار موج موازی با سد ،ولتاژ اعمال شده و قطبش اسپینی به میدان مغناطیسی بستگی دارد.

واژگان كليدى : سد الكتريكى-مغناطيسى،تابع آيرى، عبور الكترون،گاز الكترونى.

# The effects of the electric-magnetic barrier on the spin transmission in the multibarrier semiconductor hetrostructures

#### Bahadivand Chegini ,Samira ; Shahri Naseri , Mahboobeh

Department of Physics, Payame Noor, Tehran, Iran

#### Abstract

In the present paper, we study spin transmission in the semiconductors based on the combination of electrical barrier and non-homogeneous magnetic fields in two dimensional electron gas. These structures are double-barrier and triplebarrier semiconductor hetero-structures that a metallic "FM" is deposited on them. Using the Airy function, effective mass approximation and the magnetic barriers approximated by delta function, we calculate transmission coefficient of tunneling electrons and spin polarization. Our results have shown that the parameters as the height and width of the electrical potential barrier, wave vector parallel to the barrier, applied bias voltage, and magnetic field are effective in the transmission coefficient.

Keywords: Electric-magnetic barrier, Airy function, Transmission probability, Electron gas.

PACS NO:72

تولید میدان مغناطسیی ناهمگن در صفحه گاز الکترونی دو بعدی می شود که بعنوان سد مغناطیسی نقش اثر اسپین فیلترینگ را ایفا می کند بطوری که سد مغناطیسی توسط تابع دلتا تعریف می شود[٥,٦].مطالعه تزریق اسپین توسط مرجع [۷] بر اساس ترکیبی از سد پتانسیل مثلثی شکل و میدان مغناطیسی ناهمگن انجام شد

اخیرا توجه زیادی به قطعات جدید اسپینترونیکی شده است.بر این اساس مطالعات تئوری [۱٫۲] و تجربی [۳٫٤] بسیاری انجام شده است.وقتی که یک نوار فرومغناطیس بر روی ساختار نامتجانس قرا داده می شود، لبه های نازک فلز فرومغناطیس سبب

مقدمه





در حالی که مرجع [۱] سد پتانسیل مربعی شکل و میدان مغناطیسی ناهمگن در نظر گرفته است. ما دراین مقاله به مطالعه تزریق اسپین با استفاده از فلز فرومغناطیس براساس مرجع [۸٫۹] در حضور سدهای پتانسیل دو گانه، سه گانه الکتریکی و میدان مغناطیسی پرداختهایم.

#### مدل

یک قطعه فلز فرومغناطیس بر روی ساختار نمیرسانای نامتجانس قرار داده ایم با اعمال ولتاژ <sub>a</sub>V و با حضور میدان الکتریکی، سدهای پتانسیل الکتریکی دوگانه و سه گانه الکتریکی را مورد بررسی قرار داده ایم شکل (۱) در لبه های فلز فرومغناطیس میدان مغناطیسی عمودی بر صفحهی گاز الکترونی دو بعدی ایجاد میشود. تابع میدان مغناطیسی را توسط تابع دلتا





شماتیکی از مدل سیستم [۸٫۹]

شکل ۱ الف .نمایشی از دستگاه سد پتانسیل دوگانه (a). نوار فرومغناطیس در تماس با ساختار نامتجانس.(b) سد پتانسیل دوگانه الکتریکی U<sub>B</sub> و U<sub>D</sub> ارتفاع سد پتانسیل الکتریکی d, c و b پهنای سد پتانسیل الکتریکی.(c) میدان مغناطیسی عمودی محدود شده در لبه های فاز فرومغناطیس. ب.نمایشی از دستگاه سد پتانسیل سه گانه.(a) . لایه فرومغناطیس در تماس با ساختار نامتجانس(b).سد پتانسیل دوگانه الکتریکیU م U م J و U ارتفاع سد پتانسیل الکتریکی و f, d, c ، c ، و g پهنای سد پتانسیل الکتریکی.(c) میدان مغناطیسی عمودی محدود شده در لبه های فاز فرومغناطیس.

هامیلتونی سیستم را بصورت زیر می نویسیم:

$$H = \left\{ \frac{d^{\mathsf{Y}}}{dx^{\mathsf{Y}}} [K_{\mathsf{y}} + \frac{\mathsf{e}}{\hbar} A_{\mathsf{y}}(x)]^{\mathsf{Y}} + \frac{\mathsf{Y}m^{*}}{\hbar^{\mathsf{Y}}} \right\}$$
$$\left[ E_{\mathsf{x}} - U(x) - \frac{\mathsf{e}\sigma g^{*}\hbar}{\mathfrak{t}m^{*}} B_{\mathsf{z}}(x) \right] \psi(x) = \circ \right\}^{(1)}$$

بیان می کنیم که در آن σ برابر است با ۱ برای اسپسن بالا و ۱– برای اسپین پایین. با اعمال شرایط مرزی و با استفاده از تابع آیری و حل دقیق معادلات مستقل از زمان شرودینگر ضریب عبورالکترون را از رابطهی زیر بدست می آوریم :

$$T_{\sigma} = \frac{K_{f}}{K_{i}} \left| \frac{c_{f}^{+}}{c_{i}^{-}} \right|^{r}$$
(7)

نتایج و حل تحلیلی

نتایج ما نشان می دهد با حضور میدان مغناطیسی ضریب عبور الکترون نسبت به نتایج قبلی مرجع [۸,۹] افزایش می یابد بطوری که ضریب عبور برای الکترونها با اسپین بالا به سمت یک میل می کند. شکل(۲) و همچنین ضریب عبور الکترون به بردار موج موازی با سد پتانسیل الکتریکی و ولتاژ اعمال شده بستگی دارد، در ساختار سد پتانسیل سه گانه الکتریکی دو پیک مشاهده میشود. در حالی که در ساختار سد پتانسیل دو گانه الکتریکی فقط یک پیک مشاهده می شود که ناشی از رزونانس تونل زنی الکترونها می باشد.رزونانس تونل زنی زمانی رخ می دهد که انرژی ذرهی فرودی با انرژی ذره در شبه چاه کوانتومی بین دو سد یکسان باشد با افزایش ولتاژ الکتریکی پیک عبور الکترون به سمت چپ میل می کند و پدیدهی استارک رخ می دهد.



شکل۲. الف. ضریب عبور الکترون برحسب انرژی جنبشی در ساختار سد پتانسیل دوگانه با ولتاژ بایاس شده Va پارامترهای استفاده شده عبارتند از:

$$\begin{split} \mathbf{c} &= \mathfrak{o} \boldsymbol{\cdot} \mathbf{A}^\circ, \mathbf{L} = \mathfrak{l} \boldsymbol{\cdot} \mathbf{A}^\circ, \mathbf{U}_{\mathrm{B}} = \mathbf{U}_{\mathrm{D}} = \boldsymbol{\cdot} / \mathfrak{o} ev, \mathbf{B} = \mathfrak{r} \\ \mathbf{b} &= \mathbf{d} = \boldsymbol{l} \boldsymbol{\cdot} \mathbf{A}^\circ, \mathbf{K}_{\mathrm{v}} = \mathfrak{r}, \mathbf{g}^* = \boldsymbol{\cdot} / \mathfrak{s} \mathfrak{t}. \end{split}$$



ب. ضریب عبور الکترون برحسب انرژی جنبشی در ساختار سد پتانسیل دوگانه با ولتاژ بایاس شده V<sub>a</sub>. پارامترهای استفاده شده عبارتند از:

$$\begin{split} b &= d = g = \texttt{Y} \cdot A^\circ, c = f = \texttt{Io}, L = \texttt{I} \cdot A^\circ, m_A = m_B = m_C \\ &= m_D = m_F = m_G = \cdot / \cdot \texttt{TV} m_e, U_B = U_D = U_G \\ &= \cdot / \texttt{oev}, g^* = \cdot / \texttt{is } \sigma = \texttt{I} \end{split}$$



شکل ۳. ضریب عبور الکترون برحسب انرژی جنبشی

$$\begin{split} b &= d = g = \text{r.}A^\circ, c = f = \text{lo}A^\circ, L = \text{l.}A^\circ, m_A = m_B = m_C \\ &= m_G = \text{.}/\text{.}\text{TV}m_e, U_B = U_D = U_G = \text{.}/\text{.}\text{ev}, g^* = \text{.}/\text{.}\text{is} \\ v_a &= \text{.}/\text{.}\text{ev}, B = \text{r.} \end{split}$$

ما توانستیم اسپین پلاریزه را در ساختار سد پتانسیل سه گانه الکتریکی ایجاد کنیم چنانچه شکل ٥ نشان می دهد که ضریب عبور الکترون با همان تقریب پارامترهای شکل ۲ برای اسپینهای بالا و پایین متفاوت است و همچنین ضریب عبور الکترون به ارتفاع سد پتانسیل الکتریکی و ولتاژ اعمال شده بستگی دارد. در شکل ۳ نشان داده ایم اسپین پلاریزه قویا به بردار موج موازی با سد پتانسیل الکتریکی بستگی دارد. با توجه به اسپین پلاریزه ایجاد شده با استفاده از رابطه زیر توانستیم احتمال قطبش اسپینی را محاسبه کنیم.

$$P(E, K_y) = \frac{T_{\uparrow}(E, K_y) - T_{\downarrow}(E, K_y)}{T_{\uparrow}(E, K_y) + T_{\downarrow}(E, K_y)}$$
(°)



شكل ٤. ضريب عبور الكترون برحسب انرژي جنبشي



مراجع :

- [1] G. Papp and F. M. Peeters, Appl. Phys. Lett. (٢٠٠١), ٧٨, ٢١٨٤
- [Y] Y. Wang, Y. Jiang, X. W. Zhang, and Z. G. Yin, J. Appl. Phys.

 $[\ensuremath{^{\circ}}]$  M. Johnson, B. R. Bennett, M. J. Ya ng, M. M. Miller, and B. V. Shanabrook, *Appl. Phys. Lett.* (1997), V1, 975

[ $\sharp$ ] J.-U. Bae, T.-Y. Lin, Y. Yoon, S. J. Kim, A. Imre, W. Porod, J. L. Reno, and J. P. Bird, *Appl. Phys. Lett.* ( $\uparrow \cdot \cdot \land$ ),  $\uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \circ \uparrow i \cdot i$ 

[°] Y. Guo, F. Zhai, B.-L. Gu, and Y. Kawazoe, *Phys. Rev.*  $({}^{\tau} \cdots {}^{\tau})$ , B

[7] K. C. Seo, G. Ihm, and K.-H. Ahn, J. Appl. Phys. (٢٠٠٤), ٩0, ٧٢٥٢

 $[^{V}]$  Y. Jiang, M. B. A. Jalil, and T. S. Low, Appl. Phys. Lett. (  ${}^{\tau}\cdots{}^{\tau}),$  A , , 1747

[A] S. S. Allen and S. L. Richardson, Phys. Rev. (1995), B ., 1179

[9] S. S. Allen and S. L. Richardson, J. Appl. Phys. (1997), V9, AA7

همانطور که در شکل ۵ مشاهده می شود قطبش اسپینی قویا به میدان مغناطیسی بستگی دارد با افزایش میدان مغناطیسی قطبش اسپینی افزایش می یابد.

# نتيجه گيرى

نتایج ما در حضور میدان مغناطیسی ضریب عبور الکترون را نسبت به مرجع [۸,۹] افزایش می دهد و همچنین توانستیم قطبش اسپینی در ساختار سد پتانسیل سه گانه الکتریکی ایجاد کنیم. نتایج ما نشان می دهد ضریب عبور الکترون به ارتفاع، پهنای سد پتانسیل الکتریکی، بردار موج موازی با سد پتانسیل الکتریکی، ولتاژ بایاس شده بستگی دارد. همچنین قطبش اسپینی با افزایش میدان مغنایسی افزایش مییابد.



شکل ۵.قطبش اسپینی برای ساختار سد پتانسیل سه گانه الکتریکی در حضور میدانهای مغناطیسی مختلف پارامترهای بکار گرفته شده عبارتند از:  $m_A = m_B = m_c = m_D = m_F = m_G = \cdot/\cdot \tau_V$  $b = d = g = \cdot, c = f = \tau_1, v_a = \cdot/vev$  $g^* = \cdot/ \epsilon.U_B = U_D = U_D = U_G = \cdot/oev$ 



# ساخت لایه های نازک نانوکامپوزیتی NiCo2O4 تهیه شده به روش کندوپاش همزمان تحت گاز

# واکنشی اکسیژن و بررسی اثر فتوکاتالیستی آن

کی احمدی، زهرا ' ؛ زمانی میمیان، محمد رضا ' ؛ محمودی قاشقای، سمانه '

ادانشکده فیزیک دانشگاه علم و صنعت ایران، نارمک، تهران

## چکیدہ

هدف از این تحقیق ساخت لایه نازی متشکل از نیکل، کبالت و اکسیژن و بررسی خواص ساختاری و فتوکاتالیستی لایه های نازی تهیه شده جهت استفاده در تخریب رنگ متیلن بلو است. در این راستا ابتا، لایه نازی NiCo<sub>2</sub>O4 به روش کنادوپاش مغناطیسی همزمان در حضور گاز واکنش پذیر اکسیژن تهیه شد. سپس آنالیز های طیف سنجی پراکندگی انرژی پرتو ایکس (EDS) و طیف سنجی مرئی- فرابنفش (UV-Vis) و تست فتوکاتالیست انجام شدند. نتایج حاصل از تست EDS وجود عناصر اکسیژن، کبالت و نیکل را در ساختار لایه نازی تهیه شده تایید می کند. با استفاده از نتایج حاصل از ست (IV-Vis) الکترون ولت برای نمونه ی ساخته شده بدست آمد. آنالیز فتوکاتالیستی لایه نازی مشخص کرد که لایه نازی AGO بعد از پنج ساعت قرار گرفتن در مقابل نور خورشید، رنگدانه های محلول متیلن بلو را تا ۴۸۵۵ درصد تخریب می کند. واژه های کلیدی: NiCo<sub>2</sub>O4، کندویاش مغناطیسی ، آنالیز EDS آنالیز SUV-Vis می کند.

# Fabrication of NiCo2O4 nanocomposite thin films prepared by co-sputtering under reactive oxygen gas and investigation of its photocatalytic effect

#### Kay-Ahmadi, Zahra<sup>1</sup>; Zamani Meymian , Mohammad Reza<sup>1</sup>; Mahmoudi Qashqay, Samaneh<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Iran University of Science and Technology, Tehran

#### Abstract

The purpose of this research is to make a thin layer consisting of nickel, cobalt and oxygen and to investigate the structural and photocatalytic properties of the prepared thin layers to be used in the degradation of methylene blue dye. In this regard, first, a thin layer of NiCo2O4 was prepared co-sputtering in the presence of reactive oxygen gas. Then EDS and UV-Vis analyzes and photocatalyst testing were performed. The EDS indicates the abundance of specific elements. UV-Vis results reflected that optical bandgap is 2.71 eV. Moreover, by using UV-Vis, photocatalytic activity of the sample was evaluated for degradation of MB dye which demonstrated 48.55% degradation rate after 5 hours under sunlight irradiation. **Keywords**: NiCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, Thin films, Co-Sputtering, EDs, UV-Vis, Photocatalysis

PACS No.

<sup>\</sup> methylene blue (MB)

نور، زوج الکترون-حفره ایجاد می کند که با شرکت در واکنش باعث تسریع واکنش می گردد [5][4]. در این فرآیند الکترون های برانگیخته و حفره های مثبت به ترتیب می توانند واکنش های کاهش و اکسیداسیون را آغاز کنند. در نهایت عوامل اکسید کننده مانند رادیکال های هیدروکسیل برای حمله به مولکول های رنگ برای تجزیه سریع و غیرانتخابی آنها تشکیل می شوند [5][8].

از میان ترکیبات مختلف ترکیبات فلزات واسطه مانند NiO ، Co<sub>3</sub>O4، Er<sub>2</sub>O3، Go<sub>3</sub>O4 و غیره می توانند به عنوان یک فتوکاتالیست برای تخریب آلاینده های آلی مانند رنگ استفاده شوند. به طور خاص ترکیبات کبالت به دلیل فعالیت های کاتالیزوری عالی، به طور گسترده استفاده می شود. یکی از روش ها برای محدود کردن کبالت سمی، استفاده از گروه فلزات دیگر از جمله نیکل، منگنز، آلومینا و آهن است که مورد مطالعه قرار گرفتهاند [1][4][5][6]. تاکنون محققان کاتالیزورهای NiCo<sub>2</sub>O4 برا سنتز کرده و دریافته اند که NiCo<sub>2</sub>O4 می تواند با موفقیت تخریب آلاینده های آلی انجام دهد. در این کار تحقیقاتی نیز با توجه به اهمیت موضوع فوتوکاتالیستی به لایه نشانی لایه نازک MiCo<sub>2</sub>O4

## مراحل تجربى

زیرلایه های شیشه ای پس از تمیزکاری درون دستگاه لایه نشانی قرارداده شدند. دستگاه کندوپاش مغناطیسی<sup>۱</sup> پس از رسیدن به خلا مناسب، فرآیند لایه نشانی با کمک دو ماده هدف فلزی نیکل و کبالت تحت جریان گاز واکنش پذیر اکسیژن به ترتیب در توان های 44 و 60 وات انجام می گیرد. روش کندوپاش دارای مزایایی نسبت به دیگر روش ها است از آن جمله می توان نرخ رسوب بالا و یکنواخت بودن سطح و همچنین کنترل ضخامت را نام برد. نرخ لایه نشانی در این کار با استفاده از ضخامت سنج کریستالی کنترل می شود که ضخامت لایه نازک در حدود ۲۰۰ تا

<sup>\</sup> Magnetron Sputtering

آنالیز طیف سنجی پراش انرژی پرتو ایکس<sup>۲</sup> برای یافتن عناصر موجود در لایه نازک NiCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub> و تشخیص درصد وزنی و اتمی آن عناصر انجام گرفت. برای مطالعه خواص نوری لایه نازک NiCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub> از آنالیز طیف سنجی مرئی- فرابنفش<sup>۲</sup> استفاده شد.

در این پژوهش خواص فتوکاتالیستی نمونه لایه نازک NiCo2O4 در مجاورت تابش نور خورشید ظاهر می شود. ابتدا ۱۰۰ میلی لیتر محلول متیلن بلو با غلظت ۴ ppm تهیه و داخل یک بشر ریخته شد. سپس یک نمونه لایه نازک NiCo2O4 (در ابعاد حدود <sup>cm2</sup> ۱×۱) داخل محلول قرار داده شد، محلول حاوى نمونه ۳۰ دقیقه در تاریکی گذاشته شد تا به تعادل برسد، پس ۳۰ دقیقه تاریکی نمونه ای از محلول برداشته شد. بعد بشر حاوی محلول و نمونه روی پایه داخل دستگاه شبیه ساز نور خورشید گذاشته شد به طوریکه نمونه در کف بشر، تقریباً در فاصله بیست سانتی متری از لامب های مختلف دستگاه (شامل دیود های نوری، زنون، تنگستن) قرار گرفت که چیدمان آزمایش در شکل ۱ به صورت شماتیک آورده شده است. با شروع نور دهی بعد از گذشت مدت یک و پنج ساعت دو نمونه از محلول متیلن بلو برداشته شد. سپس ۳ نمونه برداشته شده برای آنالیز طیف سنجی مرئى- فرابنفش برده شدند تا طيف جذب نمونه ها اندازه گيرى شود.



شكل ۱ : چيدمان آزمايش فتوكاتاليستى براى لايه نازك NiCo2O4

- <sup>\*</sup> Energy Dispersive Spectroscopy (EDS)
- <sup>\*</sup> Ultraviolet and Visible Spectroscopy (UV-Vis)
- <sup>\*</sup> Part Per Million (ppm)





برای اطمینان از درست انجام گرفتن فرآیند لایه نشانی و انباشت اتم های مورد نظر روی زیرلایه و همچنین یافتن درصد وزنی و اتمی عناصر سازنده لایه از آنالیز طیف سنجی پراش انرژی پرتو ایکس استفاده شده است. شکل۲ تصویر SEM با بزرگنمایی ۶۵۰۰ برابر از سطح پوشش را نشان می دهد. سطح نمونه دارای پوشش یکنواختی می باشد که در آن عیوب سطحی اندکی وجود دارد.



شکل ۲ : تصویر SEM از لایه نازک NiCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub>

در شکل۳ نمودار شدت پیک عناصر یک نقطه بر حسب انرژی بر روی لایه نازک NiCo2O4 با آزمون EDS مشاهده می شود.

از نمودار EDS مربوط به نمونه تهیه شده درصد وزنی و اتمی مربوط به زیرلایه سیلیکون حذف شد. نتایج درصد وزنی و اتمی عناصر در آزمون EDS نشان می دهد که اکسیژن ۹۱/۰۴٪، کبالت ۸/۳۴٪ و نیکل ۲۰/۶۲٪ از درصد وزنی لایه نازک NiCo2O4 را تشکیل می دهند.

برای بدست آوردن اطلاعات در مورد انرژی نوار ممنوعه لایه ها، از آنالیز طیف سنجی مرئی– فرابنفش کمک گرفته شد. در رابطه ۱، رابطه بین انرژی نوار ممنوعه (E<sub>g</sub>) و ضریب جذب "α" مواد نیمه هادی، با فرمول معروف تاک' ارائه شده است [1]: در جایی که hv



شکل۳: نمودار EDS لایه نازک NiCo2O4 یک تابت مرتبط به انرژی فوتون است، α ضریب جذب است، B یک ثابت مرتبط به ماده است. با رسم نمودار <sup>2</sup>(αhv) بر حسب (hv) برای n های مختلف دیده می شود که نمودار رسم شده به ازای T=n با نمودار مقالات مرجع همخوانی بهتری دارد، به عبارت دیگر لایه های نازک NiCo2O4 نیمه رسانایی با باند گپ مستقیم است. (۱) (hv) منحنی <sup>2</sup>(αhv) را بر حسب انرژی فوتون فرودی (hv) شکل ۴ منحنی <sup>2</sup>(αhv) را بر حسب انرژی فوتون فرودی (hv) سبز رنگ بر منحنی افقی ۲/۷۱ الکترون ولت می باشد. مقدار کوچک انرژی نوار ممنوعه حدود ۳ الکترون ولت لایه نازک NiCo2O4 را بعنوان یک فتوکاتالیست کارآمد تحت نور مرئی تبدیل می کند.



شکل۴ : منحنی <sup>2</sup>(αhv) بر حسب انرژی فوتون ورودی (hv) برای لایه نازک NiCo2O4 حاصل از UV-Vis

<sup>\</sup> Tauc formula



همچنین طیف سنجی UV-Vis برای نظارت بر تغییرات در تخریب فتوکاتالیستی MB نور خورشید نیز استفاده شد (شکل۵). غلظت MB در زمان های مختلف تابش با حداکثر جذب در طول موج ۶۶۴ نانومتر تعیین شد. همانطور که در شکل۵ مشاهده می شود با شروع تابش شبیه ساز نور خورشید از ۲ تا ۵ ساعت نمودار جذب کمتر می شود.



شکل۵ : طیف جذبی در ۳ زمان مختلف محلول MB در حضور فتوکاتالیست NiCo2O4

برای اندازه گیری درصد تخریب و از بین رفتن رنگ آلاینده رابطه ۲ به کار برده شد. طبق رابطه بیر-لامبرت' مقدار جذب محلول با غلظت آن نسبت مستقیم دارد[7] . پس بجای غلظت مقدار جذب MB در رابطه قرار گرفت، Co میزان جذب اولیه قبل تابش و Ct میزان جذب ثانویه در زمان t را نشان می دهد. بر همین اساس می شود درصد تخریب را در هر ساعت بر حسب ساعت صفر محاسبه کرد، که در شکل۶ نمودار درصد تخریب در ساعت ۱ و ۵ نشان داده می شود که بالاترین آن در ساعت پنجم با مقدار جذب رنگ لایه نازک ۸۹نوی می باشد.

$$D(\%) = (C_0 - C_t) / C_0 \times 10$$
(7)

) Beer-Lambert



شکل۶ : نمودار درصد تخریب ۱ MB ۱ ساعت پس از شروع نور و ۵ ساعت پس از آن در حضور لایه نازک NiCo<sub>2</sub>O4

علاوه بر این برای درک کمی فرآیند فتوکاتالیستی، ثابت سرعت واکنش با استفاده از داده های تخریب مربوطه در یک مدل خط مرتبه اول تعیین می شود. بر اساس رابطه ۳، k نشان دهنده ثابت سرعت واکنش می باشد. شیب نمودار خط قرمز منطبق بر داده های (Co-Cl) Ln (تغییرات لگاریتمی غلطت نسبی MB باقی مانده در محلول) بر حسب زمان در شکل ۷ همان k می باشد، که مقدار آن در اینجا <sup>1-</sup> ۱/۱۲ می باشد.



شکل۷: نمودار ثابت تخریب فتوکاتالیستی محلول MB در حضور NiCo<sub>2</sub>O4 برای درک عملکرد واکنش فتوکاتالیستی، لازم است گونههای فعال اصلی برای نابودی (تخریب) MB ایجاد شود (مطابق شکل۸). عملکرد واکنش فتوکاتالیستی به صورت دو مدل طبق معادلات زیر شرح داده می شود. مدل۱: هنگامی که لایه نازک NiCo<sub>2</sub>O4 در معرض نور خورشید قرار می گیرند، جفت های الکترون-حفره روی سطح NiCo<sub>2</sub>O4 ایجاد می شوند. الکترونهای تولید شده نوری می توانند با مولکولهای O2 روی سطح واکنش دهند تا رادیکالهای آنیون سوپراکسید را تشکیل دهند ، در حالی که حفره

ها می توانند با آب جذب شده واکنش دهند تا رادیکالهای هیدروکسیل تشکیل دهند. سپس آلایندههای جذب شده در محل های فعال NiCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub> توسط گونههای فعال (حفرهها، رادیکالهای آنیون سوپراکسید و رادیکالهای هیدروکسیل) اکسید شدند. مدل۲: افزایش قابل توجهی در فعالیت نوری تحت تابش نور خورشيد را مي توان به كاهش نوتركيب الكترون ها و حفره های حاصل از نور توسط ماده NiCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub> نسبت داد. پس از آن، MB جذب شده بر روی سطح NiCo2O4 توسط تابش نور خورشید برانگیخته شد. به دنبال آن الکترونها از MB برانگیخته به نوار رسانایی NiCo<sub>2</sub>O4 تزریق شدند، سپس اکسیژن محلول می تواند الکترون را برای تولید رادیکالهای آنیون سویر اکسید مهار کند. در نهایت، آلایندههای MB توسط گونههای فعال راديكالهاي آنيون سويراكسيد تجزيه شدند.

$$NiCo_2O_4 \rightarrow Sunlight \rightarrow h^+ + e^-$$

$$e^- + O_2 \rightarrow O_2^+$$

 $h^+ + OH^- \rightarrow OH^*$ 

 $h^+ + OH^{\bullet} + O_2^{\bullet-} + MB \rightarrow degradation products$ Scheme II:

 $MB_{(ads)} \rightarrow Sunlight \rightarrow MB^*_{(ads)}$ 

 $MB^*_{(ads)} + NiCo_2O_4 \rightarrow NiCo_2O_4(e) + MB^+_{(ads)}$ 

02/02

Sunlight

 $NiCo_2O_4(e) + O_2 \rightarrow NiCo_2O_4 + O_2^{-1}$ 

 $O_2^{\bullet-}$  + MB  $\rightarrow$  degradation products NiCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub>

CO<sub>2</sub>+H<sub>2</sub>O



purposes," vol. 187, no. May, pp. 49-64, 2019.

C. Applications, "Piezo- and photocatalytic activity of ferroelectric ZnO: Sb thin films for the efficient

OH'/OH-

نتایج آزمون فتوکاتالیست نشان می دهد که NiCo2O4 یک ماده فتوکاتالیست مناسب برای تخریب رنگ در برابر نور خورشید

نتيجه گيري

فتوكاتاليست هاى لايه نازك NiCo2O4 با موفقيت توسط كندوياش مغناطيسي سنتز شدند. أناليز EDS نقطه اي تشكيل لايه نازک یکنواخت NiCo<sub>2</sub>O4 را با توجه به درصد وزنی تایید کرد. آنالیز UV-Vis از لایه نازک NiCo2O4 نشان داد که آن نیمه رسانایی با نوار ممنوعه (باند گپ) مستقیم است. انرژی نوار ممنوعه (E<sub>g</sub>) لايه نازک NiCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub> الکترون ولت می باشد كه بر اساس أن مي تواند عملكرد خوب فتوكاتاليستي داشته باشد. آنالیز فتوکاتالیستی زیر نور خورشید با کمک طیف جذبی توسط دستگاه UV-Vis نشان داد که لایه نازک NiCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub> بعد از پنج ساعت در مقابل نور خورشید رنگدانه های محلول متیلن بلو را تا ۴۸/۵۵ ٪ تخریب می کند و ثابت سرعت واکنش تخریب آن برابر ۰/۱۲ h<sup>-1</sup> می باشد.

سياسگزاري

با سپاس و تقدیر ویژه از خواهر مهربانم سرکار خانم اعظم کی احمدی که همواره بنده را مورد لطف و محبت بسیار خود قرارداده اند و مرا در مراحل مختلف يژوهش ياري كردند.

#### مرجعها

- I. Saafi et al., "Some physical investigations on [1] NiCo2O4 thin films for potential applications," Appl. Phys. A Mater. Sci. Process., vol. 127, no. 9.
- S. Mardliyah and S. Sunaryono, "Impact of [2] NiCo2O4 Composition on Methylene Blue Photodegradation Fe3O4/NiCo2O4 by Nanocomposites," J. Magn. Its Appl., vol. 1, no. 2, pp. 34-39, 2021.
- A. Shokrgozar, K. Seifpanahi-shabani, and B. [3] Mahmoodi, nanocomposite and evaluation of its photocatalytic dye (Reactive Red 120) degradation ability using response surface methodology," vol. 216, pp. 389-
- I. Saafi, T. Larbi, A. Amlouk, and M. Amlouk, "Optik Physical investigations and DFT model calculation on Zn 2 SnO 4 - ZnO (ZTO-ZO) alloy thin fi lms for wettability and photocatalysis

[5]



degradation of Rhodamine- $\beta$  dye pollutant," 2020.

- J. Di, M. Zhu, R. Jamakanga, X. Gai, Y. Li, and R. [6] Yang, "Electrochemical activation combined with advanced oxidation on NiCo2O4 nanoarray electrode for decomposition of Rhodamine B," *J. Water Process Eng.*, vol. 37, no. February, p. 101386, 2020.
- Maryamsadat Ghorashi, "The investigation of [7] electrical and photocatalytic properties of nonstoichiometric TiO2 in the form of nanopowder and thin film," 2010.




# بهینهسازی عملکرد سلول خورشیدی غیرفولرنی PM6:Y6 با عملیات سطحی یووی- اوزون

راعیانی ، داود<sup>او۲</sup> ؛ عنابی میلانی ، المیرا<sup>او۲</sup> ؛ عسگری ، اصغر<sup>او۲و۳</sup>

<sup>ا</sup>دانشکاره فیزیک، دانشگاه تبریز، ایران <sup>ا</sup>گروه تحقیقاتی ادوات فوتونیکی، پژوهشکاره فیزیک کاربردی و ستاره شناسی، دانشگاه تبریز، ایران <sup>الگ</sup>روه میکروالکترونیک، دانشگاه استرالیای غربی، استرالیا

#### چکیدہ

در این مقاله، با اعمال عملیات سطحی یووی- اوزون به لایه ترابرد الکترون در یک سلول خورشیدی کپهای نامتجانس PM6: Y6 بازده از ۷/۵٤ درصد برای ۱۰ ثانیه عملیات سطحی به ۱۲/۶٦ درصد در بهترین حالت ارتفا پیدا کرده است. بازده بهینه سلول خورشیدی برای مدت زمان ۲۰ ثانیه از عملیات سطحی یووی- اوزون بدست آمده است. با افزایش زمان عملیات، برای مقادیر بالاتر از ۲۰ ثانیه، میزان بهینه سازی کاهش یافته است. عملیات یووی- اوزون نقص های مربوط به تهی جای های اکسیژن در لایه ZnO را اکسید کرده و مقاومت داخلی لایه را کاهش داده و ترابرد حامل در فصل مشترک پلیمر/لایه ترابرد را افزایش می دهد. واژه های کلیدی: سلول خورشیدی آلی غیرفولرنی، کپه ای نامتجانس، عملیات سطحی، یووی- اوزون، لایه ترابرد

# Performance improvement of PM6:Y6 non-fullerene solar cell with UV-Ozone surface treatment

Raeyani, Davoud<sup>1,2</sup>; Annabi Milani, Elmira<sup>1,2</sup>; Asgari, Asghar<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup> Faculty of Physics, University of Tabriz, Iran <sup>2</sup> Photonics Devices Research Group, Research Institute of Applied Physics and Astronomy, University of Tabriz, Iran <sup>3</sup> Microelectronics Group, University of Western Australia, Australia

#### Abstract

In this article, by applying UV-ozone surface treatment to the electron transport layer in a PM6: Y6 bulk heterojunction solar cell, the efficiency has increased from 7.54% for 10 sec of UV-Ozone treatment to 12.46% in the best condition. The optimal efficiency of the solar cell has obtained for 20 seconds of UV-Ozone surface treatment exposure. As the UV-ozone treatment time increases from 20 sec, the efficiency decreases. UV-ozone treatment oxidizes defects related to oxygen vacancies in the ZnO layer and as a result, reduces the internal resistance and increases carrier transport at the polymer/transport layer interface.

Keywords: Non-fullerene Organic Solar Cell, Bulk Heterojunction, Surface treatment, UV-Ozone, Transport Layer

PACS No.70

رساندن اثرات مخرب بر زمین و طبیعت از اصلی ترین اهداف در این زمینه می باشد. انرژی خورشیدی به عنوان جایگزینی مناسب و مطلوب برای تحقق این اهداف در نظر گرفته شده است. سلول های خورشیدی آلی از جمله مطلوب ترین ادوات برای تبدیل مقرون به صرفه انرژی خورشیدی محسوب می شوند. یک سلول

با کاهش منابع سوخت فسیلی و تقاضای فزاینده برای انرژی پایدار و پاک، نیاز به جستجوی منابع انرژی تجدیدپذیر مورد توجه واقع شدهاست. تولید انرژی بیشتر و بهطور همزمان به حداقل

مقدمه



خورشیدی آلی معمولی متشکل از اتصالات ناهمگن کیهای یک شبكه مزدوج پليمر-فولرن ميباشد [۱].

سلولهای خورشیدی پلیمری (PSC)، شامل مخلوطی از پلیمرهای مزدوج نوع P به عنوان دهندهها و نیمرساناهای نوع n به عنوان پذیرندهها هستند، که بین یک آند و یک کاتد ساندویچ شدهاند. نیمرساناهای پذیرنده نوع n مورد استفاده در این نوع از سلول های خورشیدی شامل مشتقات فولرن، پلیمرهای مزدوج نوع n و نیمرساناهای آلی نوع غیرفولرنی (NF-OS) می شود. در بین این پذیرندهها، پذیرندههای نوع NF-OS مزایای متمایزی نشان دادهاند، از جمله: تنظیم آسان ناحیه جذب و سطح انرژی الکترونی، جذب زیاد، پایداری مورفولوژیکی خوب و نیز قابل استفاده بودن در ادوات انعطاف پذیر [۲٫۳].

از اینرو، سلولهای خورشیدی آلی از نوع غیرفولرنی توجه زیادی را به خود جلب کردهاند و بازده تبدیل توان آنها به سرعت رو به افزایش است. این مقدار اخیرا تا ۱۷ درصد رسیدهاست [٤].

تاکنون روشهای مختلفی برای دستیابی به ارتقاء بازده در سلولهای خورشیدی استفاده شدهاست. بخش اساسی این تحقيقات بر اعمال تغييرات در لايه انتقال حامل تمركز دارد. منظور از لایه انتقال حامل، اولین لایه نهشت شده بر روی بستره ITO و آخرین لایه قبل از لایهنشانی الکترود فلزی میباشد که به ترابرد بهتر حامل كمك ميكند.

روش،هایی مانند بازپخت، عملیات سطحی یووی- اوزون [٥,٦] ، عمليات پلاسما [٧,٨] و افزودن مواد ناخالصي [٩,١٠] برخي از بهینهسازیهای مورد استفاده در لایه انتقال حامل هستند. در این روشها بهبود خواص مورفولوژیکی و الکتریکی لایههای انتقال حامل بسيار مهم هستند.

در مقایسه با این روش ها، عملیات سطحی یووی- اوزون بهعنوان روشی مؤثر برای ایجاد تغییرات در ترازهای سطحی و اصلاح نقصها در فیلم نازک اکسید زینک، بدون نیاز به ماده افزودنی خاصی، در نظر گرفته می شود. از تحقیقاتی که در این زمینه انجام شده است می توان به موارد زیر اشاره کرد.

اسمال و همکاران [۱۱] گزارش کردند که با اعمال یووی – اوزون به یک سل- ژل ترکیبی اکسیدزینک- پلیونیل پیرولیدون میتوان عملکرد افزاره را بهبود بخشیدند. همچنین بایی و همکارانش [۱۲] گزارش کردند که عملیات طولانی مدت (۱۵ دقیقه) یووی-اوزون بر روی نانوفیلم اکسیدروی باعث افزایش تابع کار به میزان ۲۰ الکترونولت می شود، در حالی که بازده تبدیل توان (PCE) دستگاه از ٤/١٧ به ٢/٣٥ كاهش مىيابد. ادهيكارى<sup>1</sup> و همكارانش [7] با اعمال یووی– اوزون به سطح نانوذرات اکسید زینک در سلول خوشیدی فولرنی PBDTTT:PCBM توانستند بازده تبدیل را از ۲/۲۹ به ۸/۲ ارتقا دهند.

در این مقاله، ما به مطالعه تاثیرات عملیات سطحی یووی- اوزون بر عملكرد سلول خورشيدي غير فولرني PM6:Y6 مي يردازيم. در این راستا، فیلم نازک اکسید زینک که نقش ترابرد الکترون را برعهده دارد، در بازههای زمانی کوتاهمدت۱۰، ۲۰و ۳۰ ثانیه در معرض عمليات يووى- اوزون گرفته و اثرات آن بر بازده سلول خورشیدی مورد بررسی قرار گرفت.

#### مواد و روش ها

. تهیه فیلم نازک ZnO

در این کار، لایه های نازک اکسید زینک از طریق فرآیند سل-ژل ساخته شد [۱۳]. روش سل– ژل یک روش بسیار ساده است که از طریق لایهنشانی محلول حاوی نمک فلز مربوطه و بهوسیله لایهنشانی چرخشی در هوای محیط انجام می شود. به طور خلاصه، ۱ گرم استات زینک و ۲۸۸ میکرولیتر اتانول آمین در ۱۰ میلی لیتر ۲-متوکسیاتانول حل شد. سپس حلال تحت سرعت ۲۵۰۰ دور در دقیقه به مدت ٤٠ ثانیه توسط دستگاه لایه نشانی چرخشی نهشت دادهشد. در ادامه، در دمای ۲۰۰ درجه سانتیگراد به مدت ۱ ساعت در هوا بازیخت شد.

<sup>1</sup> C. E. Small

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> ZnO-poly vinylpyrrolidone

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> S. Bai <sup>4</sup> P. Adhikary

 ۲. ساخت سلول خورشیدی و عملیات سطحی یووی-اوزون:

در ابتدا برای تمیز کردن بسترههای اکسیدقلع ایندیوم (ITO)، آنها را با آب دیونیزه، استون و ایزوپروپانول در حمام التراسونیک هر کدام به مدت ۱۵ دقیقه قرار دادهشد. سپس محلول استات زینک برروی ITO با روش چرخشی پوشش داده و در دمای ۲۰۰ درجه سانتیگراد به مدت ۱ ساعت در هوا بازپخت شد. در ادامه، فیلم نازک بدست آمده در زمانهای مختلف در معرض عملیات سطحی یووی- اوزون قرار گرفت. سپس به لایهنشانی مخلوط لایه فعال برروی فیلم اکسید زینک در محفظه گلوباکس پرشده با گاز نیتروژن پرداخته شد. در نهایت، ۲۰ نانومتر تریاکسید مولیبدن عنوان الکترود فلزی با استفاده از روش لایهنشانی تبخیری و به کمک ماسک بر روی لایه فعال نهشت دادهشد. شکل ۱ تصویر شماتیک ساختار سلول خورشیدی مربوطه را نشان می دهد.



شکل ۱ : طرح شماتیک سلول خورشیدی فولرنی گزارش شده در این مقاله.

نتايج

شکل ۲ منحنی جریان- ولتاژ سلول خورشیدی غیرفولرنی PM6:Y6 برای زمان های ۱۰، ۲۰ و ۳۰ ثانیه از عملیات سطحی یووی- اوزون و بدون عملیات سطحی را نشان میدهد. باتوجه به شکل، برای حالتی که عملیات یووی- اوزون اعمال نشده است، منحنیها رفتار ناپایداری از خود نشان میدهند. در حالت بدون عملیات سطحی، همه منحنیها رفتاری S مانند از خود نشان میدهند و ولتاژ مدارباز یکسانی دارند. منحنی S شکل اغلب دلیلی

بر وجود جریان شانت° در افزاره است و نشانگر وجود نشت در سلول خورشیدی است [۱٤]. با انجام عملیات سطحی یووی-اوزون به مدت حداقل ۱۰ ثانیه این رفتار S شکل حذف شده و سلول خورشیدی رفتاری متعارف از خود نشان دادهاست. این نشانگر آن است که بیشترین میزان نشت از طریق سطح لایه اکسید زينک اتفاق افتاده است و با اعمال عمليات سطحي به اين لايه بهبود قابل توجهی در رفتار سلول خورشیدی مشاهده می شود. با افزایش زمان عملیات یووی- اوزون به ۲۰ ثانیه مقاوت شانت بهبود قابل توجهي نسبت به حالت ١٠ ثانيه از خود نشان دادهاست. درحالی که مقاومت سری تغییر چندانی نشان ندادهاست. بهترین حالت برای سلول خورشیدی برای حالت ۲۰ ثانیه ثبت شده است و با افزایش زمان عملیات سطحی به ۳۰ ثانیه علی رغم عدم تغییر چندان در شیب منحنی – که بیانگر یکسان بودن مقاومت شانت و سری برای دو حالت ۲۰ و ۳۰ ثانیه است- جریان اتصال کوتاه کاهش یافته است. در نتیجه بازدهی کمتری برای حالت ۳۰ ثانیه از عمليات سطحي نشان مي دهد.



شکل۲ : نمودار جریان ولتاژ سلول خورشیدی غیرفولرنی PM6:Y6 برای زمانهای مختلف از عملیات سطحی یووی- اوزون.

<sup>5</sup> Shunt



سطحی و حالت ۲۰ ثانیه عملیات سطحی یووی- اوزون می باشد. با توجه به شکل مقدار جریان تجمعی در حالتی که به اشباع می رسد، به ترتیب برای حالتهای بدون عملیات سطحی و ۲۰ ثانیه عملیات سطحی برابر با ۲/۶ و ۱۹/۸ میلی آمپربرسانتی مترمربع است. افزایش چگالی جریان تجمیعی برای حالت ۲۰ ثانیه عملیات سطحی در مقایسه با حالت بدون عملیات سطحی، بیانگر تاثیر قابل توجه بهینه سازی سطحی انجام شده بر سطح لایه اکسیدزینک و کاهش نقص ها و تله های سطحی بر روی این لایه است.



شکل ۳ : (الف) بازده کوانتومی خارجی و (ب) چگالی جریان تجمیعی سلول خورشیدی غیرفولرنی PM6:Y6 به صورت تابعی از طول موج نور ورودی، برای حالت با و بدون عملیات سطحی یووی- اوزون.

جدول ۱ مشخصات سلول خورشیدی غیرفولرنی PM6:Y6 شامل بازده، فاکتورپرشدگی، ولتاژ مدارباز و چگالیجریان اتصال کوتاه را نشان می دهد. باتوجه به جدول، ولتاژ مدارباز برای حالتهای مختلف عملیات سطحی، تغییرات چندانی را نشان نمىدهد. اما جريان اتصالكوتاه با افزايش زمان عمليات يووى-اوزون تا ۲۰ ثانیه افزایش یافته است و سپس برای حالت ۳۰ ثانیه كاهش چگالى جريان مشاهده مىشود. همچنين فاكتور پرشدگى برای سلولخورشیدی غیرفولرنی PM6:Y6 با افزایش عملیات يووى- اوزون، افزايش يافته است و بعد از حالت ۲۰ ثانيه عمليات سطحی تقریبا به حالت اشباع رسیدهاست و پس از آن تغییر چندانی ندارد. بازده سلول خورشیدی نیز با افزایش زمان عملیات سطحی تا ۲۰ ثانیه افزایش و سیس کاهش پیدا کردهاست. نتایج جدول ۱ به وضوح بیانگر آن است که مدت زمان ۲۰ ثانیه از عمليات سطحي يووي- اوزون بهينهترين حالت براي اين سلول خورشیدی بوده است. نتایج مربوط به حالت بدون عملیات سطحی، بهدلیل این که منحنی جریان ولتاژ آن رفتار یک سلول خورشیدی عادی را از خود نشان نداده است، گزارش نشدهاست.

جدول ۱ : مشخصههای سلول خورشیدی فولرنی PM6:Y6 برای زمانهای

مختلف از عمليات سطحي يووي– اوزون.							
مدت زمان عملیات یووی- اوزون	چگالی جریان اتصال کوتاہ mA/cm^2	ولتاژ مدار باز mV	فاکتورپرشدگی %	بازده %			
۱۰s	۳۲/۰۹	424/9	۳۲/۳	۲/۵۴			
۲۰۶	44/01	V48/8	۳۷/۵	17/49			
٣٠s	377/9	1441.	۳λ/Υ	٩/۴٩			

شکل ۳ (الف) بازده کوانتومی خارجی سلول خورشیدی غیرفولرنی PM6:Y6 برای حالت بدون عملیات سطحی و حالت اعمال ۲۰ ثانیه یووی- اوزون را نشان میدهد. شکل بیانگر آن است که عملیات سطحی به میزان قابل توجهی بازه کوانتومی خارجی سلول خورشیدی را ارتقا داده است، درحالیکه جایگاه پیکهای مشخص شده در هر دو منحنی تقریبا یکسان بودهاست. شکل ۳ (ب) مربوط به منحنیهای چگالی جریان تجمیعی سلول خورشیدی غیرفولرنی PM6:Y6 برای حالت بدون عملیات



*ابن \_\_\_\_\_*مقالەنامە شانزدە

[A] F.H. Wang, H.P. Chang, C.C. Tseng, C.C. Huang, H.W. Liu, Influence of hydrogen plasma treatment on Al-doped ZnO thin films for amorphous silicon thin film solar cells, Curr. Appl. Phys. **11** (2011) S12– S16.

J. Dong, Y. Zhao, J. Shi, H. Wei, J. Xiao, X. Xu, J. Luo, J. Xu,
 D. Li, Y. Luo, Q. Meng, *Impressive enhancement in the cell performance of ZnO nanorod-based perovskite solar cells with Al-doped ZnO interfacial modification, Chem. Commun.* 50 (2014) 13381–13384.

[1.] X. Liu, X. Li, Y. Li, C. Song, L. Zhu, W. Zhang, H.-Q. Wang, J. Fang, *High-Performance Polymer Solar Cells with PCE of 10.42% via Al-Doped ZnO Cathode Interlayer, Adv. Mater.* **28** (2016) 7405–7412.

[11] C.E. Small, S. Chen, J. Subbiah, C.M. Amb, S.-W. Tsang, T.-H. Lai, J.R. Reynolds, F. So, *High-efficiency inverted dithienogermolethienopyrrolodione-based polymer solar cells, Nat. Photonics.* **6** (2012) 115–120.

[1Y] S. Bai, Z. Wu, X. Xu, Y. Jin, B. Sun, X. Guo, S. He, X. Wang, Z. Ye, H. Wei, X. Han, W. Ma, *Inverted organic solar cells based on aqueous processed ZnO interlayers at low temperature, Appl. Phys. Lett.* **100** (2012) 203906.

[17] L. Znaidi, Sol-gel-deposited ZnO thin films: A review, Mater. Sci. Eng. B. **174** (2010) 18–30.

[11] R. Saive, S-Shaped Current–Voltage Characteristics in Solar Cells: A Review, IEEE J. Photovoltaics. **9** (2019) 1477–1484.

## نتيجه گيرى

بهطورکلی، ما در این مقاله به بررسی اثرات عملیات یووی-اوزون برروى لايه انتقال الكترون (ZnO) يرداختيم، كه باعث بهبود عملکرد سلول خورشیدی در زمانهایی از مرتبه چند ۱۰ثانیه شدەاست. يارامترھايى مانند بازدە، فاكتوريرشدگى چگالی جریان اتصال کوتاه برای زمان عملیات سطحی ۲۰ ثانیه در مقایسه زمانهای کمتر بهبود قابل توجهی را نشان دادهاست. که این احتمالاً به دلیل از بین رفتن نقص،ها و تلههای ناشی از تهى جاى هاى اكسيژن بو دەاست. بااين حال، با افزايش زمان عمليات سطحي، بازده انتقال الكترون و در نتيجه چگالي جريان كاهش يافتهاست. كه احتمالاً به دليل زيادتر شدن ميزان اكسيداسيون در لایه اکسید زینک و به وجود آمدن نقص های جدید بودهاست. در نتيجه، افزاره ساخته شده با ۳۰ ثانيه عمليات سطحي يووي-اوزون بهنسبت عملکرد ضعیفی از خود نشان دادهاست. درکل، این روش به دلیل قابلیت تنظیم نواقص در لایه نازک اکسید زینک با زمان عملیات، در آینده می تواند راه را برای بهبود و ارتقا عملکرد انواع ادوات ايتوالكترونيكي با مواد فعال مختلف باز كند.

## مرجعها

[1] R. Xue, J. Zhang, Y. Li, Y. Li, Organic Solar Cell Materials toward Commercialization, Small. 14 (2018) 1801793.

[Y] L. Duan, N.K. Elumalai, Y. Zhang, A. Uddin, Progress in nonfullerene acceptor based organic solar cells, Sol. Energy Mater. Sol. Cells. 193 (2019) 22–65.

[<sup>r</sup>] J. Hou, O. Inganäs, R.H. Friend, F. Gao, *Organic solar cells based on non-fullerene acceptors, Nat. Mater.* **17** (2018) 119–128.

[1] F. Qi, K. Jiang, F. Lin, Z. Wu, H. Zhang, W. Gao, Y. Li, Z. Cai, H.Y. Woo, Z. Zhu, A.K.Y. Jen, *Over 17% Efficiency Binary Organic Solar Calls with Photogenopage Reaching 1000 nm Englished by* 

Solar Cells with Photoresponses Reaching 1000 nm Enabled by Selenophene-Fused Nonfullerene Acceptors, ACS Energy Lett. 6 (2021) 9– 15.

[•] D. Li, W. Qin, S. Zhang, D. Liu, Z. Yu, J. Mao, L. Wu, L. Yang, S. Yin, *Effect of UV-ozone process on the ZnO interlayer in the inverted organic solar cells*, *RSC Adv.* **7** (2017) 6040–6045.

[1] P. Adhikary, S. Venkatesan, N. Adhikari, P.P. Maharjan, O.

Adebanjo, J. Chen, Q. Qiao, *Enhanced charge transport and photovoltaic performance of PBDTTT-C-T/PC70BM solar cells via UV–ozone treatment*, *Nanoscale*. **5** (2013) 10007.

[Y] E. Polydorou, A. Zeniou, D. Tsikritzis, A. Soultati, I. Sakellis,

S. Gardelis, T.A. Papadopoulos, J. Briscoe, L.C. Palilis, S. Kennou, E. Gogolides, P. Argitis, D. Davazoglou, M. Vasilopoulou, *Surface passivation effect by fluorine plasma treatment on ZnO for efficiency and lifetime improvement of inverted polymer solar cells, J. Mater. Chem. A.* **4** (2016) 11844–11858.





# تأثیر اندازه، طولموج و زاویهی تابش بر گرمادرمانی توسط نانوذرهی طلا، مبتنیبر تشدید یلاسمون سطحی

سلیمانی، فاطمه<sup>۱</sup>؛ صاحب سرا، پیمان<sup>۱</sup>؛ پورشریف، اکرم<sup>۳</sup> <sup>۱</sup> دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان ۲ دانشکده مهندسی مواد، گروه نانومواد، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

#### چکیدہ

یکی از روشهای درمان سرطان خون استفاده از گرمادرمانی براساس تشاید پلاسمون سطحی توسط نانوذرات طلا است. در این پژوهش طیفهای تشاید پلاسمون سطحی برای نانوکرههای تکی طلا با شعاعهای ۴۰، ۶۰ و ۸۰ نانومتر در محیطهای خونی متغیر ۱٫۳۴ و ۱٫۳۸ با استفاده از روش المان محدود در ناحیه فروسرخ نزدیک شبیه سازی شده اند، که در آن ۱٫۳۴ ضریب شکست متناظر با محیط سلولی سالم و ۱٫۳۸ ضریب شکست متناظر است با محیط سلولی سرطانی است. نتایج به دست آمده نشان می دهد که ضریب جذب با افزایش اندازه نانو ذرات افزایش می یابد. همچنین با افزایش ضریب شکست، طیفهای جذب به طول موج های بلندتر انتقال می یابد.

واژه های کلیدی: سرطان خون، گرمادرمانی، نانوذراتطلا، تشدید پلاسمون سطحی

# The effect of size, wavelength, and reflection angle on heat therapy by gold nanoparticle, based on surface plasmon resonance

#### Soleimani, Fatemeh<sup>1</sup>; Sahebsara, Peyman<sup>1</sup>; Poursharif, Akram<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan <sup>2</sup> Department of Material Engineering, nanomaterial group, Isfahan University of Technology, Isfahan

#### Abstract

One of theatment methods for leukemia is the use of heat therapy based on Surface Plasmon Resonance, by gold nanoparticles. In this research, the surface plasmon resonance spectrum for single spherical gold nanoparticles with radius of 40, 60, and 80 nm in different blood environments (1.34 and 1.38) has been simulated using the finite element method in the near infrared region. The refraction coefficients 1.34 and 1.38 correspond to the healthy and infected cell environments, respectively. The result obtained from these investigations shows that by the increasing in the size of the nanoparticles, the absorption coefficient increases. Also by increasing the refractive index, the absorption spectrum shifts to a larger wavelength.

Keywords: leukemia, heat therapy, gold nanoparticles, surface plasmon resonance

PACS No. 78, 87

شیمی درمانی، اشعه درمانی، و همچنین وارد کردن لیزر، امواج مایکروویو و بسامدهای رادیویی است، که هر کدام از این روش ها عوارضی به دنبال دارند. به عنوان مثال جراحی تومور، تنها برای تومورهای تازه شکل گرفته، و تومورهایی که از لحاظ مکانی کاملاً

سرطان یکی از عوامل مرگ و میر در جهان است برهمین اساس محققان روش های متعددی را جهت درمان این بیماری در نظر گرفتهاند. روشهای اصلی درمان سرطان، شامل جراحی،

مقدمه





**شکل ۱** :( الف ) طرح مشربندی شده از نانوکرات طلا در سیال خون بر روی منشور به وسیله نرم افزار کامسول.(ب) زاویه تابش در طرح کلی جذب نور توسط نانوذرات طلا.

شناخته شده و در دسترس هستند، مؤثر است. در روش شیمی درمانی نیز از داروهای شیمیایی برای مبارزه با سرطان استفاده می شود. این داروها سمی بوده و ممکن است به سلولهای سالم نیز آسیب وارد کنند، بنابراین عوارض جانبی قابل توجهی دارند. در روش اشعه درمانی که از یونیز اسیون با انرژی بالا استفاده می شود و شامل پر توی ایکس، گاما یا الکترون می باشد، اغلب برای از بین بردن سلولهای باقی مانده سرطان بعد از عمل به کار می رود. این پر توها می توانند باعث آسیب رسیدن به بافتهای سالم و نزدیک به سلولهای سرطانی و یا بافتهایی که در مسیر پر تو تابش قرار دارند، شوند [۱ و ۲]. در کنار این روش ها گرما درمانی یک روش درمانی بدون عارضه است که در آن بافتهای سرطانی درمعرض گرمای زیادی قرار دارند، و هدف آن درمان بیماری در بدن است [۳].

یکی از این روش ها درمانی، گرمادرمانی به وسیلهی نانوذراتی است که از پدیده تشدید پلاسمون سطحی استفاده میکنند. الکترونهای رسانش بر روی یک فلز نجیب، تحت تأثیر تحریک نوری به طور جمعی نوسان میکنند؛ به این مد جمعی پلاسمون میگویند. تشدید پلاسمون یک نوار جذبی دارد و زمانی رخ میدهد که بسامد فوتون فرودی با نوسان جمعی الکترونهای رسانش منطبق شود. این نوسانات که در سطح فلز مشهودتر هستند، «تشدید پلاسمون سطحی» (SPR) نامگذاری شدهاند [۴ و بالایی دارند نمایانتر میباشد.

در تحقيق حاضر، از نانوذراتي كه منشأ تشديد پلاسمون سطحي دارند، استفاده می شود. نانوذرات طلا به دلیل گذارهای الکترونی بین نواری در طول موجهای مرئی و فروسرخ نزدیک، طیف جذبی قوی در این نواحی نشان میدهند. از آنجایی که تابش نور مرئی به بافت بدن آسيب وارد نمي كند، از اين خاصيت مي توان درکاربردهای پزشکی استفاده نمود. زیرا نانوذرات طلا این پتانسیل را دارند تا به صورت هدفمند وارد بافت توموری و سلولهای سرطانی شوند ودر نتیجه فقط سلولهای سرطانی را تحت تأثیر قراردهند. نانوساختارهای طلا با جذب نور در ناحیهی مرئی و فروسرخ نزدیک و نیز جذب گرما در مدت زمان کمتر از پیکوثانیه ابزار مناسبی برای درمان سرطان هستند. همچنین به دلیل خواص منحصربهفرد خود، پتانسیل استفاده در طیف وسیعی از کاربردهای پزشکی را دارند [۶]. نانوذرات در اثر تشدید پلاسمون سطحی(SPR)<sup>۱</sup> تحت تأثیر محیط ذرات و همچنین ابعاد فیزیکی ذرات نتایج مختلفی را از خود نشان میدهند که قابل بهینه کردن است [٧]. علاوه بر گرمادرمانی این نانوذرات به دلیل جذب بالای آن در اثر پدیده تشدید پلاسمون سطحی می توان از اختلاف قله جذب در محیطهای سالم و سرطانی که ضرایب شکست متفاوتی دارند، به تشخیص همزمان با درمان این بیماری نیز پرداخت.

زرینا به تسعیس عمرتان با درمان بی بیماری یو پرداخت. پیش از ساخت نانوذرات جهت گرمادرمانی و یا تشخیص، به کمک شبیه سازی برهم کنش نور با نانوذرات می توان به بهینه سازی ابعاد نانوذرات و یافتن زاویه تابش مناسب برای بیشینه کردن اثر تشدیدی، اقدام نمود. یکی از روش های پرکاربرد برای بررسی این برهم کنش، بررسی طیف جذبی آنها در ناحیهی نورمرئی و فروسرخ نزدیک می باشد که این عمل در اثر جذب و پراکندگی حاصل می شود. این ضرایب را می توان با استفاده از نظریه مای و انتگرال بردار پوینتینگ موج پراکنده شده روی سطح نانوذرات بدست آورد. در این نظریه روابط (۱) و (۲) به ترتیب مربوط به ضریب جذب و پراکندگی می باشند [۸]

$$C_{\rm sca} = \frac{4}{\sqrt{\epsilon_0 / E_0^2 \mu_0}} \int s. \, ndx \tag{(1)}$$

<sup>1</sup> Surface Plasmon Resonance







**شکل ۲** : نمودارهای جذب بر حسب طول موج در شعاعهای ۴۰، ۶۰ و ۸۰ نانومتر.

قلههای جذب با افزایش ضریب شکست و افزایش اندازه نانوذرات به سمت طول موجهای بلندتر تغییر مکان میدهند. مشاهده می شود که قله جذب در محیط های سرطانی با ضریب شکست ۱٫۳۸ برای نمونههای ۴۰، ۶۰ و ۸۰ نانومتر، به ترتیب در طول موجهای ۷۲۷، ۷۳۷ و۷۵۶ نانومتر اتفاق می افتد. این ضرایب در محیطهای سالم خون با ضریب شکست ۱٫۳۴ به ترتیب ۷۱۹، ۷۲۷ و ۷۴۷ نانومتر می باشد. از این مقادیر می توان برای سنجش میزان حساسیت، که از اختلاف مقادیر ارتفاع قله نسبت به میزان اختلاف

$$C_{\rm abs} = \frac{4}{\sqrt{\epsilon_0 / E_0^2 \mu_0}} \int U. \, dv \tag{(Y)}$$

## روش انجام پژوهش

در این پژوهش از نرمافزار کامسول استفاده شده است. نرمافزار کامسول یک مجموعهی شبیهسازی است که میتواند معادلات دیفرانسیل سامانههای غیرخطی را توسط مشتقهای جزئی به روش اجزای المان محدود در فضای یک، دو وسه بعدی حل کند. در پژوهش حاضر، از فیزیک الکترومغناطیس در حوزه بسامد استفاده کردهایم که در آن ضرایب از حل معادلات مشتق جزئی (PDE)<sup>۲</sup> در زمان و فضا گرفته شده است. در شکل ۱ ( الف ) ساختار به صورت دوبعدی نشان داده شده است. برای سنجش طیفها از موسوم به چیدمان کرشمن میباشد، در نظر گرفته شده است. همچنین در قسمت (ب) شکل ۱، زاویه تابش در کار حاضر جذب نور توسط نانوذرات طلا نشان داده شده است. شرایط مرزی شامل دو شرط نور ورودی و خروجی در بالا و پایین و یک شرط مرزی متناوب در دو طرف میباشد. مشیندی متعارف لحاظ

شده است، که به طور بهینه توسط کامسول انجام می گیرد. ضریب شکست سلول ها از سالم تا بیمار در بازهی [۱٬۳۴ تا ۱٬۳۷] و ضریب شکست سلول های سرطانی در بازهی [۱٬۳۸ تا ۱٬۴۲] قرار می گیرد [۱]. طبق تحقیقات انجام شده نانوذرات طلا تا اندازهی ۱۰۰ نانومتری، می توانند از رگهای خونی عبور کنند و در عرصهی پزشکی به کار گرفته شوند [۹]. برهمین اساس ما در این پژوهش نانوذرات طلا را به اندازه های مختلف ۴۰، ۴۰ و ۸۰ نانومتر، در ضریب شکست های ۱٬۳۴ و ۱٬۳۸۸ به ترتیب در بستری از خون های سالم و سرطانی، مورد بررسی قرار داده ایم. اندازه گیری ها در ناحیه ی مرئی و فروسرخ انجام پذیرفته است.

شکل ۲ نتایج حاصل از میزان جذب به وسیله نانوذرات طلا ۴۰، ۶۰ و ۸۰ نانومتری را در محیط سرطانی و سالم را نشان میدهد.

نتايج

<sup>2</sup> Partial Differential Equation

ڭانتىڭان بىلىتىيى

# نتيجه گيري

در این پژوهش نشان داده شد که در فرایند تشدید پلاسمون سطحی، با افزایش اندازهی نانوذرات، ضریب جذب افزایش می پاید و در نتیجه میزان گرمای تولید شده در ذرات بزرگتر، بیشتر است. البته محاسبه ميزان حساسيت بيان مي كند كه نانو ذرات با اندازه ۶۰ نانومتر حساسیت بیشتری از خود نشان میدهند. همچنین هرچه ضریب شکست بیشتر باشد، طیف جذبی به سمت طول موجهای بزرگتر جابهجا میشود. زمانی که ضریب جذب افزایش یابد گرما در ناحیهی سرطانی زیاد شده و سلولهای سرطانی از بین می روند. در زاویه آلفا، با افزایش ضریب شکست، قله به سمت زاویههای بزرگتر جابهجا می شود. و همچنین با افزایش اندازهی نانوذرات، تغییرات ضریب جذب نسبت به زاویهی تابش زیاد شده و در نتیجه ضریب جذب افزایش می یابد. در ناحیهی فروسرخ نانوذرهی ۸۰ نانومتری نسبت به دو نانوذره دیگر دارای جذب بیشتری بوده، نانوذرهی ۶۰ نانومتری دارای جذب متوسط، و جذب نانوذرهی ۴۰ نانومتری کمترین است. بنابراین ییشنهاد می شود که از نانوذرهی ۶۰ نانومتری درناحیهی فروسرخ استفاده شود، زیرا که از نظر اقتصادی به صرفهتر خواهد بود. علاوه بر آن به دلیل میزان حساسیت بیشتر در این اندازه می توان از آن به منظور تشخیص همزمان نیز استفاده کرد. در آخر از نمودار زاویه تابش نور در محیط سرطانی مشاهده می شود که جذب در نانو ذرات ۶۰ نانومتری در حدود ۴۰ درجه بیشینه است.

#### مرجعها

- Sambou A, Ngom B D, GomisL, Beye A C, "Turnability of the plasmodia response of the gold nanoparticles in infrared region"; *American Journal of Nanomaterials* 4, 3 (2016) 63-69.
- [2] Huang X, El-Sayed M A, "Plasmonic photo-thermal therapy", Alexandria Journal of Medicine, 47 (2011) 1-9.
- [3] Lopes A et al. "Probing deep tissues with laser-induced thermotherapy using near infrared light", Laser in Medical Science, 35 (2020) 43-49.
- [4] Fuller M A, Köper I, "Biomedical application of polyelectrolyte Coated spherical gold nanoparticles"; *Nano Converg* 6 (2019) 11-17.
- [5] Bai X et al., "The basic properties of gold nanoparticles and their applications in tumor diagnosis and treatment", Int. J. Mol. Sci. 21, 7 (2020) 2480-2497.
- [6] Reynoso F J, "Modeling of near infrared laser-mediated plasmonic heating with optically tunable gold nanoparticles for thermal therapy", Georgia Institute of Technology (*Thesis*) (2011).
- [7] Hertaeg M J, Tabor R F, Garnier G, "Effect of protein adsorption on the radial wicking of blood droplets in paper", *Journal of Colloid and Interface Science*, 528 (2018) 116-123.
- [8] Khajegi P, Rashidi-Huyeh M. "Optical properties of gold nanoparticles: Shape and size effects", Journal of Optics and Photonics 15 (2021) 41-45
- [9] Sztandera K, Gorzkiewicz M, Klajnert-Maculewicz B, "Gold nanoparticles in cancer treatment", *Molecular pharmaceutics* 16 (2018) 1-23.

ضریب شکست به دست میآید، استفاده نمود. میزان حساسیت پارامتری است که برای تشخیص بیماری به کار برده می شود. میزان ضریب جذب بر حسب زاویه تابش در طول موجهای متناظر با قلههای جذب، برای هر اندازه و هر ضریب شکست در شکل ۳ نشان داده شده است.



**شکل ۳**: نمودارهای جذب بر حسب زاویه تابش در شعاعهای ۴۰، ۶۰ و ۸۰ نانومتر. مقادیر به دست آمده در هر نمودار با توجه به طول موج مربوط به بیشینه قله جذب به دست آمده در شکل ۲ رسم شده است. (نمودار آبی رنگ مربوط است به ضریب شکست ۱٬۳۴ و نمودار قرمز رنگ مربوط است به ضریب شکست ۱٬۳۸.)



ساخت و بررسی خواص مغناطیسی آرایههای نانوسیم آهن-کبالت-ایندیوم الکتروانباشت شده در قالبهای AAO : اثر زاویه بین میدان مغناطیسی اعمالی و محور نانوسیم

متقیان، سحر '؛ نجفی، مژگان\*

گروه فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد همدان، همدان

محروه فیزیک، دانشگاه صنعتی همدان، همدان

چکیدہ

آرایههای نانوسیم آهن-کبالت-ایندیوم آلیاژی مغناطیسی ، با استفاده از روش الکتروانباشت درون قالب AAO رشد دادهشدند. قالب AAO با استفاده از روش آندایز دو مرحلهای ساخته شد. قطر نانوسیم های ساخته شده و فاصله بین حفرهای، به ترتیب، ۳۲ نانومتر و ۱۰۰ نانومتر بود. به منظور بررسی اثر زاویه بین میدان مغناطیسی اعمالی و محور نانوسیم ها بر خواص مغناطیسی نانوسیم ها، زاویه بین ۰ تا ۹۰ درجه تغییرداده شد. دیده شد که با افزایش زاویه، خواص مغناطیسی کاهش می یابند. وادارندگی از ۱۵۸۵ ارستد به ۳۹۷ ارستد و نسبت مربعی از ۲۷۰ به ۲۰٬۰۷ کاهش می یابند. تکنیکهای SEM و EDX و CRD جهت بررسی ریخت شناسی قالب و نانوسیمها و ترکیب و ساختار بلوری و خواص مغناطیسی نانوسیم ها مورد استفاده قرار گرفتند.

كلمات كليدي: نانوسيمهاي ألياژي مغناطيسي ، قالب اكسيد ألومينيوم أندي، الكتروانباشت، خواص مغناطيسي.

Fabrication and Investigation of magnetic properties of FeCoIn nanowire arrays electrodeposited in AAO templates: Effect of angle between applied magnetic field and nanowire axis

#### Mottaghian, Sahar<sup>1</sup>; Najafi, Mojgan<sup>2\*</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Islamic Azad University, Hamedan

<sup>2</sup> Department of Physics, Hamedan University of Technology, Hamedan

#### Abstract:

CoFeIn magnetic alloy nanowire arrays using electrodeposition method were grown into the AAO template. AAO template was fabricated using two step anidization method. Nanowires diameter and interpore distance were 32 and 100 nm respectively. To investigate the effect of angle between applied magnetic field and nanowire axis on magnetic properties of the nanowires, the angle was verified between 0° and 90°. It was observed that as the angle increases, the magnetic properties decrease. The coercivity from 1485 Oe to 397 Oe and the squareness from 0/76 to 0/07 decreased.

Keywords: Magnetic alloy nanowires, Anodic aluminum oxide template, Electrodeposition, Magnetic properties.



#### مقدمه:

برای ساخت نانوسیمهای مغناطیسی روشهای مختلفی مانند سل-ژل [۱] انباشت با بخار شیمیایی [۲] و انباشت الکتروشیمیایی [۳] وجود دارد. روش الكتروانباشت داراي مزيتهاي سرعت بالا، قيمت پایین و پرشدگی حفرههای بالا است [٤]. قالب اکسید آلومینیوم آندی(AAO) خصوصیات مورد علاقهای مانند حفرههای یک شکل استوانهای و موازی با هم و با تراکم بالا و با طول و قطر یکسان دارند [٥]. چون، قالبهای اکسید آلومینیوم آندی دارای حفرههای یکسان موازی با هم هستند، با رشددادن نانوسیمها درون این حفرهها، نانوسیمهایی موازی با هم خواهیمداشت که در جهت عمود بر سطح قالب رشدکردهاند و در نتیجه می توانیم برای بررسی اثر زاویه، زاویه بین میدان مغناطیسی اعمالی و محور نانوسیم را بهطور دقیق تنظیم کنیم [7]. بنابراین؛ برای بررسی اثر زاویه بین میدان مغناطیسی اعمالی و محور نانوسیمها، نانوسیمهای عمود بر سطح قالب و بهطور الكتروشيميايي انباشتشده در قالبهاي اکسید آلومینیوم آندی در مقایسه با نانوسیمهایی که به روشهای محلول شیمیایی ساخته میشوند و نانوسیمها بهطور تصادفی در محلول جهتگیری کردهاند، مناسبتر هستند [۷].

## جزييات تجربي:

# ساخت قالب اكسيد آلومينيوم آندى:

ابتدا ورقههای آلومینیوم پانچ شدند تا به شکل دایرههایی با قطر ۸ میلیمتر درآیند، سپس به مدت ٦ دقیقه با استون و در دستگاه اولتراسونیک چربی زدایی شدند و سپس به مدت ٢٠ دقیقه در کوره و در دمای ٤٥٠ درجه سانتیگراد در اتمسفر گاز آرگون مورد تابکاری قرار گرفتند. نمونهها به مدت ٤ دقیقه در محلول ٣ مولار از سود غوطه ور شدند. نمونهها در محلولی از اسید پرکلریک و

اتانول با نسبت حجمي (١ بـ ٤) بـ عنوان الكتروليت و تحت پتانسیل ۲۵ ولت و به مدت ۲ دقیقه در دمای محیط الکتروپولیش شدند آندی کردن آلومینیوم طی دو مرحله به انجام رسید: مرحله نخست در یک سل دو الکترودی شامل نمونه آلومینیوم الكتروپوليش شده به عنوان الكترود كار و الكترود پلاتين به عنوان الکترود شمارنده و با محلولی از اسید اگزالیک ۲/۳ مولار به عنوان الکترولیت، تحت ولتاژ ٤٠ و به مدت ٢٤ ساعت و در دماي ٧ درجه انجام شد. نمونهها در تری اکسید کروم ۲/۳ مولار و اسید فسفريک ٥/٠ مولار به مدت ٢٤ ساعت در دماي ٤٠ درجـه غوطـه ور شدند. مرحله دوم آندی شدن مشابه مرحله اول با این تفاوت که مدت زمان این مرحله ۱ ساعت است؛ انجام شد. فرآیند نازک سازی لایه سدی در ۳ مرحله انجام شد که طی آن، ولتاژ از ٤٠ به ۸ ولت کاهش یافت. در مرحله اول ولتاژ با نرخ ٤ ولت بـر دقیقـه به ۲۰ ولت کاهش یافت، سپس با نرخ ۲ ولت بر دقیقه به ۱۰ ولت کاهش یافت و سرانجام با نرخ ۱ ولت بر دقیقه به ۸ ولت کاهش یافت. در انتهای مرحله سوم، آندی شدن به مدت ۳ دقیقه در ۸ ولت ادامه داده شد [۳].

# الكتروانباشت آهن و كبالت و اينديوم در قالب:

الکترود پلاتین به عنوان الکترود شمارنده و قالب به عنوان الکترود کار استفاده شد. الکتروانباشت با موج سینوسی با بسامد ۲۰۰ هرتز و ولتاژ قله به قله ۳۰ ولت و در دمای محیط و به مدت ۱۵ دقیقه انجام شد. الکترولیت، شامل حمام آبی نمکهای سولفات آهن (FeSo4) ۰۰/۰ مولار و سولفات کبالت (CoSo4) ۲۱/۰ مولار و اسید بوریک(H<sub>3</sub>BO<sub>3</sub>) ۲۱/۰ مولار به عنوان بافرکننده و اسید اسید بوریک (C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O<sub>6</sub>) ۲۱/۰ مولار میباشد و کلرید ایندیوم (InCl<sub>3</sub>) ۳۰۰/۰ مولار میباشد. ریختشناسی قالب field-emission scanning یا استفاده از electron microscopy (SEM; MIRA3 TESCAN) تحقیق

Energy dispersive شد. ترکیب شیمیایی نانوسیمها با استفاده از spectroscopy(EDX;MIRA3 TESCAN) (EDX;MIRA3 TESCAN) د ساختار بلوری نانوسیمها با استفاده از X'Pert Pro; Cu Ka radiation; λ= 0.154 nm ) برای بررسی خواص مغناطیسی، حلقههای هیسترزیس با استفاده از vibrating sample magnetometer (VSM; MDKB, Iran) در دمای اتاق به دست آمدند.

# نتايج و بحث:

مورفولوژی، ترکیب و ساختار:

شکل ۱ تصویر SEM نانوسیمهای تعبیه شده در قالب را نشان میدهد.



شکل ۱: تصویر نانوسیمهای تعبیه شده در قالب.

جدول ۱ درصد غلظت یونهای Co ،Fe و In در محلول الکتروانباشت و درصد مقادیر Co ،Fe و In الکتروانباشت شده در نانوسیم را نشان می دهد.

جدول ۱: درصد غلظت یونهای Fe و Co و In در محلول الکتروانباشت و درصد مقادیر Fe و Co و In الکتروانباشت شده در نانوسیم.

محلول	ون ها در	غلظت یـ	مھــا در	وزنــی اتــ	درصــد و
الكتروليت به مولار (M)			نوسيم(W%)		
Fe+2	C0+2	In+3	Fe	In	
۰/۰۵	٠/١٢	•/••٣	37/37	۵۶/۹۸	۵/۶۹

شکل ۲ الگوی XDR بهدست آمده از نانوسیمهای آهن-کبالت-ایندیوم را نشان می دهد.



شكل ۲- الگوى XRD مربوط به نانوسيمهاي آهن-كبالت-اينديوم.

نانوسیمهای آهن-کبالت-ایندیوم ساختار bcc FeCo با پیکهای پخشی (۱۱۰) و (۲۰۰) در ۰۵/ ٤۵ درجه و ۲۵/۳۵ و پیکربندی ترجیح داده شده (۱۱۰) دارند.

اثر زاویه بین میدان مغناطیسی اعمالی به نانوسیمها و محور بلند نانوسیمها بر خواص مغناطیسی نانوسیمها:

حلقههای هیسترزیس در 90 ≥ θ ≥ 0، در شکل ۳ نشان داده شده است.



شكل ٣- حلقه هاى هيسترزيس در 90  $\geq \theta \geq 0$ .

وابستگی زاویهای وادارندگی و نسبت مربعی در شکل ٤ (الف-ب) نشان دادهشده است.



نانوسیمها جهتگیری کنند. از سوی دیگر، میدان مغناطیسی اعمالی باعث می شود؛ دوقطبی های مغناطیسی تمایل داشته باشند؛ در جهت میدان جهتگیری کنند. هرچه زاویه بین میدان مغناطیسی اعمالی و محور بلند نانوسیمها بیشتر باشد؛ انرژی ناهمسانگردی شکلی بیشتر تضعیف می شود و در نتیجه خواص مغناطیسی کمتر می شوند. [۸].

نتيجه گيري:

آرایه های نانوسیم مغناطیسی آلیاژی آهن-کبالت-ایندیوم با در قالب آلومینا به وسیله الکتروانباشت متناوب، ساخته شدند. با افزایش زاویه بین میدان مغناطیسی اعمالی و محور بلند نانوسیم، وادارندگی و نسبت مربعی اندازه گیری شده با حلقه های هیسترزیس، کاهش پیدا کرد.









شکل ٤- وابستگی زاویهای (الف) وادارندگی و (ب) نسبت مربعی.

کاهش خواص مغناطیسی با افزایش زاویه (θ) به این علت است که ناهمسانگردی مغناطیسی شکلی قوی در نانوسیمها وجود دارد که باعث میشود؛ دوقطبیهای مغناطیسی درجهت محور بلند

مرجعها:

[1] Q. Wang, X. Sun, S. Luo, L. Sun, X. Wu, M. Cao and C. Hu, "Controllable Synthesis of PbO Nano/Microstructurs Using a Porous Alumina Template"; Crystal Growth 7 (2007).

[2] Z. Fan, D. Dutta, C. J. Chien, H. Y. Chen, E. C. Brown, P. C. Chang and J. G. Lu, "*Electrical and Photoconductive Properties of Vertical ZnO Nanowires in High Density Arrays*"; Applied Physics Letters **89** (2006) 213110-1-213110-3.

[3] M. Najafi, A. A. Rafati, M. Khorshidi Fart and A. Zare, "Effect of the PH and Electrodeposition Frequency on Magnetic Properties of Binary Co<sub>1-x</sub>Sn<sub>x</sub> Nanowire Arrays"; Journal of Materials Research **29** (2014) 190-196.

[4] J. Gu, L. Liu, H. Li, Q. Xu, H. Sun, "Annealing effects on structural and magnetic properties of Co-doped ZnO nanowires synthesized by an electrodeposition process"; Journal of Alloys and Compounds **508** (2010) 516-519.

[5] M. Arefpour, M. Almasi-Kashi, A. Ramazani, E. Golafshan, "*The investigation of perpendicular anisotropy of ternary-alloy magnetic nanowire arrays using first-order-reversal-curve (FORC) diagrams*"; Journal of Alloys and Compounds **583** (2014) 340-344.

[6] A. Safeer, L.A. Azam, D. Bashir, S. Khan, B. Parveen, N. Ahmad, "*Effect of Mn (12 at%) substitution on magnetic anisotropy and magnetization reversal of equiatomic FeCo alloy nanorod arrays*"; Physica B **586** (2020) 412138.

[7] T. Zou, H. Li, N. Zhao, C. Shi, "*Electromagnetic and microwave absorbing properties of multi-walled carbon nanotubes filled with Ni nanowire*"; Journal of Alloys and Compounds **496** (2010) L22-L24.

[8] S. Aslam, A. Das, M. Khanna, B.K. Kuanr, "*Concentration gradient Co–Fe nanowire arrays: Microstructure to magnetic characterizations*"; Journal of Alloys and Compounds **838** (2020) 155566.





# مطالعه خواص اپتیکی GaN و AlN و مقایسه نتایج تقریب TB-mBJ با GGA-PBE

کیانی صدر ، بشری<sup>1</sup> ؛ شکری، علی اصغر<sup>1 و2</sup> ؛ عابدی روان، بهرام<sup>3</sup> <sup>5</sup>گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور ، تهران، ایران <sup>2</sup> گروه نانو فیزیک، دانشکاده فیزیک، دانشگاه الزهرا، تهران، ایران <sup>3</sup> گروه فیزیک، دانشگاه علوم و فنون هوایی شهید ستاری، تهران، ایران

#### چکیدہ

ساختار نواری و خواص اپتیکی نیمرساناهای AlN و GaN در فاز سولفید روی با استفاده از نظریه تابعی چگالی و بکارگیری بسته محاسباتی Wien2k به کمک دو رهیافت TB-mBJ و GGA-PBE مورد بررسی قرار گرفته است. قسمتهای حقیقی و موهومی تابع دیالکتریک، انتقالهای اپتیکی و همچنین تابع اتلاف انرژی الکترون با استفاده از تقریب فاز کاتورهای ( RPA) برای هر دو رهیافت، محاسبه و نتایج آنها با هم و دیگر دادههای تجربی مقایسه شده است. از محاسبات نتیجه می-شود که با بهبود گاف انرژی به کمک TB-mBJ و انتقال نوارهای رسانش بطرف انرژیهای بالا، تمامی ساختارهای اپتیکی ایت های بالاتر میل نموده و این موضوع سبب کاهش ثابت دیالکتریک و ضریب شکست میشود.

واژه های کلیدی: نظریه تابعی چگالی، خواص اپنیکی، تابع دی الکتریک، تابع اتلاف انرژی الکترون

# Optical Properties Of AlN and GaN and Comparing the Results of the Approximation TB-mBJ and GGA-PBE

Kianisadr, Boshra<sup>1</sup>;Shokri, Aliasghar<sup>1,2</sup>; Abedi Ravan, Bahram<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Payame Noor University (PNU) Tehran, Iran
 <sup>2</sup> Department of Nanophysics, Faculty of Physics, Alzahra University, Tehran, Iran
 3 Faculty of Basic Sciences, Shahid Sattari Aeronautical University of Science and Technology, Tehran, Iran

#### Abstract

The electronic band structure and optical properties of AlN and GaN semiconductor in zinc-blende phase are investigated using density functional theory by employing the Wien2k package with GGA-PBE and TB-mBJ approaches. The real and imaginary parts of the dielectric function  $\varepsilon(\omega)$ , optical transitions and the electron energy loss function are calculated within the random phase approximation (RPA) for both approaches. The calculation results of these two approaches are compared with each other and other experimental data. It can be seen that by improving the energy gap with the help of TB-mBJ and moving the conduction bands towards high energies, all the structures in the optical spectra tend towards higher energies and this causes the dielectric constant and refractive index decrease.

Keywords: DFT, Optical Properties, Dielectric Function, Energy Loss Spectrum

#### PACS N. 60

نیتروژن در مقایسه با دیگر عناصر گروه پنجم، منجر به ایجاد پیوند قوی با عناصر گروه سوم شده که بهدنبال آن باعث بالا رفتن دمای ذوب نیمرساناهای نیتروژندار می شود. اصولا پیوند شیمیایی ترکیبات III-N از نوع کوالانسی است اما به دلیل اختلاف زیادی

در سالهای اخیر، نیمرساناهای نیتروژندار گروه III-N، به دلیل کاربردهای فراوان در فناوریها به عنوان نیمرساناهای بسیار مفید، مورد توجه قرار گرفتهاند. الکترونگاتیوی بالا و شعاع کم

مقدمه



که بین الکترونگاتیوی دو عنصر سازنده ترکیب وجود دارد، پیونـد بین دو عنصر شامل پیوند یونی نیز می شود. بنابراین مجموع این عوامل سبب ایجاد خواص جالبی در ترکیب نیتروژن با دیگر عناصر گروه سوم شـده اسـت. در ایـن میـان نیتریـدهای GaN و AlN توجه دانشمندان را در دو بعد نظری و تجربی بخود جلب كرده است. اين توجه بدليل خواص الكتروني منحصر به فردشان مثل گاف نواری مستقیم و عریض (که معادل منطقهی تابش از نور مرئی تا فرابنفش است) و ثابت دی الکتریـک کوچـک بـوده کـه کاربردشان را در قطعات اپتیکی با طول موج های آبی و ماورای بنفش و الکترونیک دماهای بالا فراهم کرده است. عـلاوه بـر ایـن، پایداری گرمایی و شیمیایی بالای این دو ترکیب باعث می شود كانديداهاي ايدهألى براي ادوات اپتوالكترونيك دماي بالا محسوب شوند و قابلیت عملکرد در محیطهای سخت را دارا باشند. در شرایط محیطی GaN و AlN در ساختار پایدار ترمودینامیکی ورتزایت (هگزاگونال) متبلور میشوند. ساختار سولفید روی بـرای GaN, InN توسط رشد برآرایی فیلم های نازک در سطح های کریستال { Si, MgO, GaAs به تثبیت رسیده است[1]. مطالعات تجربی و محاسباتی زیادی بر روی ساختار ورتزایت این دو ترکیب صورت گرفته اما از زمان رشـد موفقیت آمیز فاز سولفید روی، کارهای زیادی بر روی آنهـا انجـام نشده است. بررسی ساختار سولفید روی بدلیل بهرهی اپتیکی بالاتر و چگالی جریان آستانهی کمتر ایـن ترکیبـات حتـی مـیتوانـد از ساختار ورتزایت مهمتر هم باشد [2]. در ایـن مطالعـه بـه بررسـی ساختار نےاری و خےواص اپتیکی GaN و AlN بےا دو تقریب GGA و mBJ و مقایسه نتایج این دو تقریب بـا یکـدیگر و بـا

## نتایج تجربی موجود خواهیم پرداخت. روش و جزئیات محاسبات

محاسبات با استفاده از کد کامپیوتری WIEN2K [8] و بر پایه نظریه تابعی چگالی و روش امواج تخت بهساخته خطی با پتانسیل کامل(FP-LAPW) انجام شده است. برای محاسبه انرژی تبادلی- همبستگی از دو تقریب شیب تعمیم یافته با تابعی پردو و همکاران [4] و MBJLDA [6و6] استفاده شده است. در این محاسبات پارامتر RK<sub>max</sub> (R شعاع کوچکترین کره موفین تین و

 $K_{max}$  بردار موج قطع است) برابر **8**، بیشینه عدد کوانتومی تکانه زاویهای برای بسط تابع موج درون کرههای اتمی برابر **10** و بردار موج قطع برای بسط پتانسیل و چگالی بار ((Ryd)  $r = G_{max}$  در نظر گرفته شده است. در تمام محاسبات همگرایی بر روی انرژی بوده و معیار همگرایی Ry **100001** انتخاب شده است. تعداد **3000** نقطه k برای همگرایی انرژی در منطقه اول بریلوئن انتخاب شده است که برای محاسبه خواص اپتیکی به **7000** نقطه k افزایش یافته است.

### نتایج محاسبات و توصیف آنها

همونطور که بالاتر اشاره شد فاز دوم پایدار AlN و GaN که تحت شرایط رشد برآرایی بر روی زیر لایه متبلور و پایدار می-گردد، ساختار سولفید روی با گروه فضایی F43m میباشد. تمامی محاسبات در کوچکترین شبکه قراردادی که یک یاخته مكعبي ساده ميباشد، انجام شده است. پارامترهاي ساختار تعادلي AIN و GaN در فاز سولفید روی با برازش مقادیر انرژی کل بر حسب حجم با معادله بيرچ -مورناگان محاسبه شده است. با توجه به اینکه طیفهای اپتیکی ناشی از انتقالهای بین نواری است، لذا قبل از هر چیز نتایج مربوط به چگالی حالتهای کلی و جزئی دو ترکیب AlN و GaN در شکل 1 گزارش می شود. همان طوری که از شکل 1 پیداست، سهم عمده حالتهای اشغال شده در زیر و نزدیک سطح فرمی برای GaN) GaN) مربوط به اوربیتال.های 2p اتم N (2p) N و بالای سطح فرمی ناشی از حالتهای 4p و 4s اتم N و 2p) Ga مى باشد. نتايج محاسبات (Al اتم 3s الم الم ساختار نواری برای GaN و AlN با استفاده از تقریب TB-mBJ (GGA-PBE) نشان میدهد که GaN یک نیمرسانا با گاف انرژی مستقیم در نقطه ی Γ به اندازه **3,14** eV و (1,71 eV) و یک نیمرسانا با گاف انرژی غیرمستقیم بین نقاط  $\Gamma$  و X به AlN اندازه 4,88eV (3,32 eV) می باشد. همان طور که مشاهده می-شود، نتایج رهیافت TB-mBJ در محاسبه ساختار نواری نتایج بهتری را در مقایسه با GGA-PBE ایجاد کرده است به طوری که در توافق بسیار خوبی با نتایج تجربی [7] و محاسباتی [8]موجود مىباشد. به منظور مقايسه بيشتر دو تقريب بالا، محاسبات ساختار نواری در حضور برهمکنش اسپین-مدار برای





GaN انجام شده است. مقدار شکافتگی اسپین مدار ΔSO در تقریب GGA-PBE)TB-mBJ) حدود 6 (12) میلی الکترون ولت محاسبه شده و مقدار تجربی آن حدود 15 meV [9] گزارش شده است.

در ادامه بر پایه نتایج بدست آمده از مطالعه ساختار نواری به بررسی خواص اپتیکی AlN و GaN تحت دو تقریب mBJ و PBE مىپردازيم. براى محاسبه تابع دىالكتريك، بايد سهم گذارهای درون نواری و بین نواری محاسبه شوند. دو سهم عمده برای تابع دیالکتریک وجود دارد. در دمای صفر کلوین، سهم ناشی از گذارهای دروننواری فقط برای فلزها قابل توجه است. گذارهای بین نواری به دو سهم گذارهای مستقیم و همچنین غیرمستقیم تقسیم می شود. در اینجا ما از گذارهای غیرمستقیم که شامل پراکندگی فونوی است و در واقع پیش بینی می شود که این دسته از گذارها سهمی بسیار جزئی در تابع دیالکتریک داشته باشند چشم پوشی میکنیم. شکل 2، تغییرات قسمت حقیقی و موهومی تابع دیالکتریک را تا انرژی eV **20** نشان میدهد. ساختارهای اصلی طیف مربوط به قسمت حقیقی تابع دیالکتریک ει(ω) که با بکارگیری تبدیلات کرامرز -کرونیک محاسبه میشود، عبارتند از: یک قله که برای AlN و در تقریب GGA-)TB-mBJ PBE) در انرژی GaN (5/42eV) و برای GaN در انرژی 7/27eV (5/51eV) قرار دارد. یک شیب کاهشی وجود دارد که بعد از آن (۵) ε۱ منفی میشود، یک کمینه که در این ترکیبات به صورت شانهای است و بهدنبال آن یک افزایش آهسته به طرف صفر در انرژیهای بالاتر دیده میشود. مقدار ثابت دیالکتریک

استاتیک برای GaN و AlN در تقریب(PBE) mBJ و MIN در تقریب (PBE) به ترتیب (PBE) محاسبه شده است.



مقادیر متناظر تجربی برای این دو ترکیب به ترتیب 5/31 [9] و 4/68 [10] گزارش شده است. همانطور که از نتایج پیداست مقادیر محاسبه شده با استفاده از تقریب GGA-PBE در مقایسه با TB-mBJ به مقادیر تجربی نزدیکتر است. اما علت کاهش ثابت دىالكتريك در تقريب mBJ نسبت به تقريب PBE را مى-توان در بخش موهومی تابع دیالکتریک جستجو کرد. مطابق شکل 2 (ستون سمت راست) تمام ساختارهای اصلی در بخش موهومی تابع دیالکتریک در تقریب mBJ نسبت به PBE به سمت انرژیهای بالاتر میل کردهاند و این امر منجر به کاهش ثابت دی-الکتریک می شود. مقادیر منفی  $(\omega)_{13}$  نشان می دهد که در این ناحیه انرژی، امواج الکترومغناطیسی کاملاً از محیط بازتابیده شده و بنابراین ماده خاصیت فلزی از خودش نشان میدهد. همانگونه که در سمت چپ شکل2 دیده می شود لبه جذب اپتیکی تابع دی-الکتریک برای AlN و GaN در تقریب mBJ (PBE) به ترتیب در انرژی حدود 5/15 (3/71) و 3/17 (1/75) الکترون-ولت قرار دارد. این مقدار آستانه گذار اپتیکی مستقیم بین بالاترین نوار ظرفیت و پایین ترین نوار هدایت ( در نقطه ۲) را می دهد که ارتباط نزدیکی با انرژی گاف نواری مستقیم این ترکیبات دارد و مقادیر بدست آمده تایید کننده این موضوع هستند. ساختارهای اصلی طیف (۵) E<sub>2</sub>(۵ با حروف a، b و c نامگذاری شدهاند. مطابق آنالیز نواری صورت گرفته برای AlN (GaN)، اوربیتال 2p اتم نيتروژن به عنوان حالت اوليه و اوربيتالهاي **3**s اتم آلومينيوم به

عنوان حالتهای نهایی (اوربیتال 2p اتم نیتروژن به عنوان حالت-های اولیه و اوربیتالهای 2s اتم نیتروژن و 4s اتم گالیوم به عنوان حالت های نهایی)، نقش اصلی در گذارهای اپتیکی را بر عهده داشته و منشأ ساختارهای a b ،a و ناشی از این انتقالهاست. در ادامه، تابع اتلاف انرژی الکترون EELS، در شکل 3 (ستون سمت چپ) نشان داده شده است. این تابع متناسب با احتمال اتلاف



شکل 3: قسمتهای حقیقی و موهومی تابع دیالکتریک برای AlN و GaN.

انرژی E در واحد طول، برای یک الکترون در حال عبور از محیط است. شاخص ترین قله در EELS، بهعنوان قله پلاسمونی شناخته میشود که بیانگر برانگیختگیهای جمعی چگالی بار الکترونی در بلور است و متناظر با یلاسمونهای حجمی است. بنابراین بیشترین اتلاف انرژی برای AlN و GaN در تقریب PBE) mBJ به ترتيب در 22/92 (21/59) و 21/02 (19/87) الكترون ولت، اتفاق می افتد. در این نقاط ε1(ω)=0 است. وجود قلههای پلاسمونی در این نقاط دور از انتظار نیست زیرا در این نقاط دامنه (٤٤(ω) نیز  $\mathbf{3}$  کوچک است. ضریب شکست  $\mathbf{n}(\omega)$  که در سمت راست شکل نشان داده شده، بهصورت تابعی از بخش حقیقی تابع دیالکتریک محاسبه شده است. مقدار ضریب شکست استاتیک در انرژی صفر برای AlN و GaN در تقریب PBE) mBJ) به ترتیب 1/93 (2/17) و 2/07 (2/43) بدست آمده است. مقادیر ضریب شکست برای این دو ترکیب به ترتیب 2/1 [11] و 2/34 [12] گزارش شده است و باز هم همانطوری که از نتایج پیداست مقادیر محاسبه شده با استفاده از تقريب PBE با نتايج تجربي همخواني بیشتری دارد. به منظور مقایسه بیشتر این دو تقریب، دو طیف قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک ترکیب GaN کار

حاضر با نتایج تجربی [9] در شکل 4 مقایسه شده است. از شکل 4 به وضوح پیداست که از بین دو تقریب مورد مطالعه TB-mBJ



و (GGA(PBE، انطباق بهتری بین طیفهای تقریب GGA(PBE) با طیفهای تجربی [8] حاصل شده است.

نتيجه گيري

با بكارگيري روش FP-LAPW و در چارچوب نظريه تابعي چگالی، خواص الکترونی و اپتیکی نیمرساناهای AIN و GaN با استفاده از دو تقریب GGA-PBE و TB-mBJ بررسی شد. محاسبات ما حاکی از آن است برای ترکیبات مورد مطالعه اگرچه رهیافت TB-mBJ در خواص الکترونی و بهبود گاف نواری بسیار قدرتمند عمل میکند اما رهیافت GGA-PBE در محاسبات خواص اپتیکی خروجی های قابل اعتمادتری نسبت به TB-mBJ ارائه میدهد. همچنین تمامی ساختارهای موجود در تقريب TB-mBJ نسبت به GGA-PBE به سمت انرژهای بالاتر میل میکنند و از شدت قلهها کاسته می شود.

مرجعها

- [1] H. Okumura, H. Hamaguchi, T. Koizumi, K. Balakrishnan, Y. Ishida, M.Arita, S. Chichibu, H. Nakanishi, T. Nagatomo, and S. Yoshida, J. Cryst. Growth, 390(1998) 189-190.
- [Y] S. H. Park and S. L. Chuang, J. Appl. Phys. 87, 353.
   [Y] P. Blaha, K. Schwarz et al. Wien2k. Universitat, Wien, Austria, 2001, ISBN 3-951031-1-2.
- [\*] P. Perdew, S. Burke, M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett, 77, (1996) 3865.
- [<sup>Δ</sup>] F. Tran, and P. Blaha, *Physical Review Letters* 102, (2009) 226401.
- [7] A. D Becke, and E. R. Johnson, J. Chem. Phys 124, 221101 (2006).
- [Y] I. Vurgaftman, J. Meyer, L.Ram-Mohan, J. Appl. Phys. 89 (2011), 5815-5875
- [^] Kafi, F. D. Khodja, F. Saadaoui, S. Chibani, A. Bentayeb, M. D Khodja, J. Comput. Electron. 19 (2020) 26-37.
- [1] M. Feneberg, M. Roppischer, CH.Cobet, PHYSICAL REVIEW B, 85, (2012) 155207.
- [1.] Akasaki, I., & Hashimoto, M. (1967). Solid State Communications, 5(11) (1967), 851-853.
- [11] M.P.Thompson and G.W.Auner, Cubic (zinc-blende) aluminium nitride (Patent No. US6518637 B1) (2003).
- [11] W.H. Moon, H.J. Hwang, Phys. Lett. A 315 (2003) 319-324.



# مطالعه ابررسانای ایبکو آلاییده شده با نانولوله کربنی و نانوذرات اکسیدآهن Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

جولایی ، مینا ؛ شاکری پور، حمیدہ

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان ۱۱ ۸۳۱–۸۶ ۸۶

يست الكترونيكي: hshakeri@iut.ac.ir

# چکیدہ

در این پژوهش به بررسی رفتار مغناطیسی ابررسانای ایبکو (Fe2O<sub>3</sub>O<sub>7.6</sub>) آلاییده شده با مقادیر ۰/۰ و ۲۰ درصدوزنی، نانولوله کربن(CNT) ومقادیر ۲/۰ و ۶/۰ درصد وزنی نانوذرات اکسید آهن (Fe2O<sub>3</sub>) تهیه شده به روش سل- ژل پرداختهایم. با استفاده از آنالیز پذیرفتاری مغناطیسی، مشاهده کردیم که دمای گذار نمونه-های آلاییده شده تفاوت زیادی با نمونهی خالص ندارند.

واژه های کلیدی: ابررسانای ایبکو (۲۰۵٫۷۲۵۰۲۲۵)، نانولوله کربن (CNT)، نانوذرات اکسید آهن (Fe2O3)، سل - ژل، دمای گذار.

## To study of YBCO superconductor dopped by carbon nanotubes and Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanoparticles

Joolaei, Mina; Shakeripour, Hamideh

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

#### Abstract

In this study, the magnetic behavior of the YBCO superconducting  $(YBa_2Cu_3O_{7-\delta})$  samples prepared by the Solgel method, and dopped with 0.5 and 0.9wt% carbon nanotubes (CNT) and 0.2, 0.4wt% Iron oxide nanoparticles (Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>), were investigated. Using magnetic susceptibility measurements, we found that the transition temperature of the samples is not much different from the pure sample.

*Keywords*: YBCO superconducting (YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7- $\delta$ </sub>), carbon nanotubes (CNT), Iron oxide nanoparticles (Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>), sol-gel, transition temperature.

PACS No.

گذار بیشتر و چگالی جریان بحرانی بالاتر، صورت گرفت. در سال ۱۹۸۷، چو و همکارانش با ساخت ترکیب<sub>6-</sub>YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>Or، موفق به

پس از کشف ابررسانایی در سال ۱۹۱۱ کارهای فراوانی برای فهم ساز و کار ابررسانایی و همچنین دسترسی به ابررساناهایی با دمای

مقدمه



افزایش میدهیم. پس از اتمام مرحله خود احتراقی، پودری نرم و حجیم، با رنگ قهوهای تیره حاصل میشود. پودر به دست آمده پس از سایش، در دمای ۸۸۰ درجه سانتی گراد جهت تکلیس به مدت ۲۶ ساعت، درون کوره قرار داده میشود. عمل تکلیس دو بار انجام میشود. سپس، پودر به دستآمده را با نانولولههای کربنی و نانوذرات اکسیدآهن که به مقدار معینی توزین شدهاند سایش داده و درون قالب ریخته و تحت فشار، پودرها شکلدهی می-شوند. نمونه ها جهت کلوخه سازی در دمای ۹۳۰ درجه سانتی-گراد تحت شار اکسیژن حرارت داده می شوند. همچنین برای جلو گیری از تشکیل فاز تتراگونال، سرد سازی نمونه به کندی انجام میشود.

## بحث و بررسی

برای بررسی خواص نمونههای ابررسانا، از آنالیز پذیرفتاری مغناطیسی استفاده شد. نتایج آنالیز پذیرفتاری شامل دو بخش حقیقی و موهومی میباشند. برای بررسی اثر نانوذرات آلاییده شده برخواص مغناطیسی ابررسانایی، پذیرفتاری مغناطیسی نمونهی خالص ونمونههای آلاییده شده با ۵/۰درصد وزنی نانولوله کربنی با آلایش ۰، ۲/۰و ٤/۰ درصد وزنی نانوذرات اکسیدآهن، تحت میدان مشاهده می شود، بخش حقیقی پذیرفتاری نمونهها دارای یک گذار مشاهده می شود، 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 می شود و با Tc نمایش داده می شود. همانطور که در شکل ۱ دیده می شود و با ت گذار نمونهها با افزایش مقدار آلایش نانوذرات اکسیدآهن، نسبت به نمونه خالص، تغییرات زیادی را نشان نمی دهند. همچنین نمونهها دارای گذار تیزی هستند که به معنای ارتباطات قوی بین دانهای و همگنی ترکیب است.

با مشتق گرفتن از قسمت حقیقی پذیرفتاری نسبت به دما، dx'/dT، میتوان دمای میانگین گذار هر نمونه را از قله نمودار به دست آورد؛ که با Tc\_peak نمایش داده میشود (شکل ۲). دستیابی به ترکیبی با دمای گذار حدود ۹۰ کلوین، که بالاتر از دمای جوش نیتروژن مایع بود، شدند[۱]. چندین پژوهش نشان داده است که آلایش مواد نانو در ابررساناهای ۵۰۰۵۲Ba2Cu3O، یک راه حل اساسی برای افزایش چگالی جریان بحرانی است اما دمای گذار افزایش چشمگیری نداشته است[۱۰–۲]. کربن به تنهایی از خود خاصیت ابررسانایی نشان نمیدهد اما در کربن به تنهایی از خود خاصیت ابررسانایی نشان نمیدهد اما در بر این هست که حضور عناصر مغناطیسی در ترکیب ابررسانا، منجر به تضعیف خواص ابررسانایی میشود. در این پژوهش به بررسی رفتار مغناطیسی ۵۰-۲ YBa2Cu3O7 در این پژوهش به بررسی رفتار مغناطیسی و نانو ذرات اکسیدآهن پرداختهایم و با مقایسه تغییرات دمای گذار ابررسانایی، مقایسهای بین اثر گذاری بیشتر هریک از این آلایش ها میکنیم.

#### روش ساخت نمونه ها

روش ساخت نمونه ها در این پژوهش، روش سل – ژل می باشد. ابتدا مواد اولیه که به صورت نیترات ترکیب موردنظراست؛ یعنیOAC(NO3)3.6H20 و Ba(NO3)2 با خلوص بالا، با نسبت مولی ۲:۲:۲ 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.

برای تهیه ژل، از اسید سیتریک استفاده می شود. محلول های ۰/۰ مولار هریک از کاتیون ها را با یکدیگر ترکیب کرده و با نرخ مناسبی وارد اسید سیتریک می شوند.

پس از تنظیم pH در بازه ٦ تا ۷، ژل را به مدت چند ساعت حرارت داده تا آب آن تبخیر شود. سپس آن را جهت خود احتراقی به کوره انتقال میدهیم. خود احتراقی در بازه دمایی ۲۸۰ تا ۳۰۰ درجه سانتی گراد انجام می شود. البته جهت خروج تمام گازهای حاصل از خوداحتراقی، دمای کوره را تا ۵۲۰ درجه سانتی گراد





شکل۲ : نمودار مشتق دمایی 'x برحسب دما برای ترکیب YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-5</sub> خالص و با آلایش ۰/۰ درصدوزنی نانولوله کربنی وآلایش نانوذرات فریت با درصدهای وزنی ٤/۰و۲/۰و ۰=x تحت میدانمغناطیسی ۸/m //۰ و فرکانس ۳۳۳Hz.

در راستای بررسی اثر نانو لولههای کربنی نیز نمونه هایی با آلایش ٤/٠ درصد وزنی نانوذرات اکسیدآهن و با آلایش ۹/۰و٥/۰=x از نانولولههای کربنی، ساخته و با آنالیز پذیرفتاری مغناطیسی، رفتارمغناطیسی نمونهها مورد بررسی قرار گرفتند.

همانطور که در شکل ۳ و ٤ دیده می شود، دمای گذار نمونهها با افزایش آلایش، نسبت به نمونه خالص کاهش یافته است.



شکل۳ : نمودار پذیرفتاری مغناطیسی برحسب دما برای ترکیب YBa2Cu<sub>3</sub>O<sub>7-6</sub> آلایش یافته با ۰/٤ درصدوزنی نانوذرات اکسیدآهن و آلایش نانولوله کربنی با درصدهای وزنی ۲۹۰۹و ۰/۵=x تحت میدانمغناطیسی ۸/۳ /۸ و فرکانس ۳۳۳Hz.



شکل٤ : نمودار مشتق دمایی 'x برحسب دما برای ترکیب YBa2Cu<sub>3</sub>O<sub>7-6</sub> آلایش یافته با ۰/٤ درصدوزنی نانوذرات اکسیدآهن و آلایش نانولوله کربنی با درصدهای وزنی ۹/۹و۰/۹ تحت میدانمغناطیسی ۸/۸ م/ و فرکانس ۳۳۳Hz.

اختلاف بین T<sub>c</sub> بهدست آمده از قسمت حقیقی پذیرفتاری و ΔTc به دست آمده از مشتق پذیرفتاری نسبت به دما را با



مشخص میکنیم که برابر با پهنای متوسط هر پیک در نمودار مشتق پذیرفتاری است. داده های مربوط به نمونه ها در جدول ۱، آورده شده است.

جدول ۲ : مقادیر  $T_c$  و  $T_{c_peak}$  و  $T_c_{peak}$  و م $T_c$  برای نمونه های آلاییده شده با نانو لوله کرول ۲ : مقادیر  $T_c$  و  $T_c_{peak}$  کربنی در ترکیب  $T_c_{peak}$  و  $T_c_{peak}$  .

YBa2Cu3O7-8+ x%CNT + v%FeO	Tc (K)	Tc_peak (K)	$\Delta T_c$ $T_c - T_c$ peak
,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,			
خالص	97/000	۹۱/۱۰۰	٠/٩٥
•=۷ و ۵. •=X	97/•70	٩٠/٩٢٥	171
¥=∙ .0 و 3. •×−X	91/120	٩٠/٣٢٥	١/٥٢
¥=• /٤ و ٥. •=٧/٤	91/710	٩٠/١٦٠	١/٤٦
×=∙.۹ و y=∙/٤	९•/९९०	۸٦/٩٦٥	٤/٠٣

با مقایسهی دادههای جدول در میابیم که کاهش دمای گذار و افزایش پهنای متوسط پیکها، با افزایش آلایش نانولولههای کربنی و نانوذرات اکسیدآهن، بیشتر میشود.

همچنین به منظور بررسی ساختار بلوری و فاز نمونهها، از نمونهها آزمون پراش پرتو ایکس گرفته شد.

همانطور که در شکل ۵ مشاهده می شود، نمونه ها تک فاز و دارای ساختار اورتورمبیک با گروه فضاییpmmm، هستند.



پارامترهای شبکهی نمونهی خالص، مقادیر ۵=۳/۸۱۷٤ م ۵=۳/۸۹۰۵۱ و c=۱۱/۵۸۹۱۶ آنگستروم را داراست. تحلیل کامل تر دادههای سایر نمونهها در دست انجام است.

نتيجه گيرى

با مطالعه ترکیب ابررسانای CNT+y%Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> و ۹/۰و ۹/۰و (x=۰/۵ و ۹/۰و ۹/۰و ۲۵۰۰) به وسیله اندازه گیری پذیرفتاری (x)۰و ۲/۰=۲ و ۹/۰و ۸/۰e۵) به وسیله اندازه گیری پذیرفتاری مغناطیسی AC، مشاهده می شود که دمای گذار نمونه های آلاییده کاهش اندکی نسبت به نمونه خالص دارند و کمترین دمای گذار مربوط به نمونه SBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7</sub> + 0.9% CNT+ 0.4%Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> می – باشد.طبق نمودار پراش پرتو ایکس نمونه ها تک فاز و دارای ساختار اورتورمبیک می باشند.

هم چنین، بررسی تاثیر آلایش همزمان نانولولههای کربنی و نانوذرات اکسیدآهن بر روی چگالی جریان بحرانی نمونه ها در دست انجام است.

## مرجعها

[1] M.-K. Wu, J. R. Ashburn, C. Torng, P. H. Hor, R. L. Meng, L. Gao, Z. J. Huang, Y. Wang, and a. Chu, "Superconductivity at 93 K in a new mixed-phase Y-Ba-Cu-O compound system at ambient pressure", Physical Review Letters, Vol. 58, No. 9, p.908, 1987. [2] P.P. Rejith, S. Vidya, Vipinlal, S. Solomon, J.K. Thomas, Flux-pinning properties of nanocrystalline HfO2 added Yba2Cu3O7-8 superconductor, Physica Status Solidi (b) 251 (2014) 809. [3]Y. Slimani, E. Hannachi, A. Ekicibil, M.A. Almessiere, F. Ben Azzouz, Investigation of the impact of nano-sized wires and particles TiO2 on Y-123 superconductor performance, J. Alloy. Comp. 781 (2019) 664-673. [4] E. Hannachi, Y. Slimani, F. Ben Azzouz, A. Ekicibil, Higher intragranular and inter-granular performances of YBCO superconductor with TiO2 nano-sized particles addition, Ceram. Int. 44 (2018) 18836-18843. [5] K.Yakinci, et al.," Enhanced superconducting properties of multi-wall carbon nanotubes added YBCO-123", J. Molecular Structure1211(2020) 128089

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

[7] Y. Slimani, M.A. Almessiere, E. Hannachi, M. Mumtaz, A.Manikandan, A. Baykal, F. Ben Azzouz, Improvement of flux pinning ability by tungsten oxide nanoparticles added in Yba2Cu3Oy superconductor, Ceram. Int. 45 (2019) 6828-6835.

[8] Y. Xu, A. Hu, C. Xu, N. Sakai, I. Hirabayashi, M. Izumi, Effect of ZrO2 and ZnO nanoparticles inclusions on superconductive properties of the melt-processed GdBa2Cu3O7-δ bulk superconductor, Physica C 468 (2008) 1363-1365.

[۹] ف. گودرزی،" ساخت و مشخصه یابی نانوکریستالهای ابررسانای YBCO آلاییده با نانولولههای کربنی(CNT)"، پایان نامه کارشناسی ارشد فیزیک، دانشگاه الزهراء(س)، ۱۳۹۰. [۱۰] م.مجیدی،"ساخت و بررسی اثر رقابتی آلایش گرافیت و نانولولههای کربنی در ابررسانای دمای بالای YBCO"، پایان نامه کارشناسی ارشد فیزیک شیمی، دانشگاه الزهراء(س)، ۱٤۰۰.





# بررسی خواص الکترونی و نوری $K_rNa_rSn_rS_{\Lambda}$ و $Rb_rNaSn_rSe_{\Lambda}$ به عنوان فوتو کاتالیست در واکنش شکافت آب

زهرا حاجی احمدی ؛ سید شهاب الدین نقوی

دانشکاره شیمی دانشگاه شهید بهشتی، تهران

چکیدہ

توسعه فوتوکاتالیست ارزان قیمت و سازگار با محیط زیست برای شکافت آب تحت نور مرئی برای تولید انرژی هیدروژن پاک برای کاهش بحران انرژی جهانی و مسائل زیست محیطی ضروری است. با استفاده از محاسبات اصول اولیه، نشان می دهیم که دو ماده Rb<sub>r</sub>NaSn<sub>r</sub>S<sub>A</sub> Rb<sub>r</sub>NaSn<sub>r</sub>S<sub>A</sub> مکه به تازگی سنتز شده اند می توانند به طور خود به خود آب را تحت نور مرئی تفکیک میکند. در این ترکیبات حضور <sup>+1</sup> RD پایدارترین حالت اکسیداسیون Sn ، اوربیتال S۵ را خالی می کند و آن را در نوار رسانایی قرار می دهد و شکاف نوار را تا ۲٫٦ الکترون ولت فراتر از ترکیبات <sup>+1</sup> Sn افزایش می دهد. علاوه بر این، <sup>+1</sup> RD از هیبریداسیون <sup>r</sup> SP و Sp<sup>T</sup>d خود برای ساخت پلی آنیونهای کووالانسی قوی استفاده می کند. نتایج ما یک نقشه راه برای توسعه فوتوکاتالیستهای پیشرفته و فراوان در زمین ارائه میکند. و آ**ژه های کلیدی**: شکافت آب، نظریه تابعیت چگالی، همترازی نوار، خواص نوری

# Electronic and optical properties of $K_r Na_r Sn_r S_A$ and $Rb_r Na Sn_r Se_A$ as promising photocatalyst for water-splitting reaction

#### Zahra Hajiahmadi; S.Shahab Naghavi

Department of Physical and Computational Chemistry, Shahid Beheshti University, Tehran 19/19/11, Iran

#### Abstract

The development of low-cost, and eco-friendly photocatalyst for visible-light driven water splitting is essential for generating clean hydrogen energy to assuage the global energy crisis and environmental issue. Using firstprinciple calculations, we show that newly synthesized  $Rb_rNaSn_rSe_A$ ,  $K_rNa_rSn_rS_A$  spontaneously split water under visible-light illumination. The  $Sn^{i+}$ —the most stable oxidation state of Sn—empties the os-orbital and places it in the conduction band, widening the band gap up to  $r, \tau eV$  beyond that of  $Sn^{r+}$  compounds. Moreover,  $Sn^{i+}$  uses its  $sp^r$  and  $sp^rd$  hybridization to build a robust covalent polyanions. Our results provide a roadmap for the development of nontoxic, earth-abundant photocatalysts. **Keywords**: water-splitting, DFT, band-alignment

PACS No.

نیمه هادی در مقیاس اتمی، کلید توسعه مواد کارآمد در کاربرد انرژی است. یکی از کاربردهای این مواد در واکنش شکافتن آب است. تولید انرژی از منابع طبیعی و در دسترس خورشیدی و آب

روش های محاسباتی گسترده منجر به پیشرفت مواد جدید شدهاست. کاوش و درک عملکرد و خواص فیزیکوشیمیایی مواد

مقدمه



می کند. بنابراین نیمه هادی های کالکوژنید چهارتایی با انواع ساختارهای مختلف خواص نوری بسیار خوبی را نشان می دهند که می تواند برای طیف گستردهای از کاربردهای نوری و تبدیل انرژی از جمله شکافت آب استفاده شود. نتایج تجربی ثابت کرد که این دو ماده پایدار هستند و دارای خواص الکترونیکی مناسبی هستند<sup>3</sup>. این خواص ویژه ما را برانگیخت تا خواص آنها را به عنوان یک ماده فوتوکاتالیست در کاربردهای شکافت آب مطالعه کنیم.

در این مقاله دو ترکیب K<sub>Y</sub>Na<sub>Y</sub>Sn<sub>r</sub>S<sub>A</sub> و Rb<sub>r</sub>NaSn<sub>r</sub>Se<sub>A</sub> که به تازگی سنتز شدهاند<sup>3</sup> را برای کاربرد شکافت آب، بهعنوان هدف تحقیق در نظر گرفتیم. از طریق محاسبات شبیهسازی مبتنی بر تئوری تابعی چگالی، خواص ساختاری، الکترونیکی و نوری این دو ساختار را مورد مطالعه قرار دادیم.

### روش محاسبات

کلیه محاسبات با استفاده از نظریه تابعیت چگالی با تقریب PBE توسط بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو انجام شده است. انرژی قطع جنبشی و چگالی بار به ترتیب ٥٠ و ٥٠٠ ریدبرگ در نظر گرفته شد. همه ساختارها کاملا ریلکس شدند تا نیرو روی هر اتم کمتر از یک میلی ریدبرگ بر آنگستروم شود. ضریب جذب نوری با استفاده از رابطه زیر محاسبه شد.

$$\alpha(\omega) = \sqrt{2}\omega(\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} - \varepsilon_1(\omega))^{1/2}$$

که 1<sup>3</sup> و 2<sup>3</sup> اجزای حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک هستند. موقعیت لبه نوار با استفاده از مدل اسلب محاسبه شده است. برای اجتناب از ایجاد ممان دو قطبی اسلبهای متقارن و غیر قطبی با ضخامت خلا ۱۵ آنگستروم ساخته شد. همچنین با استفاده از روش تخمین تجربی که به الکترونگاتیوی عناصر مرتبط است از رابطه زیر محاسبه شد.

$$E_{CB,VB} = E_0^{NHE} + (\chi_A^n \chi_B^m \chi_{Sn}^3 \chi_Q^8)^{1/15} \pm E_g$$

نقش مهمی را در تبدیل انرژی با حداقل تاثیر زیست محیطی ایف می کند. کاربرد عملی شکافت آب به دلیل ترمودینامیک نامطلوب با پتانسیل بالا برای هدایت کل فرآیند با سینتیک آهسته از طریق انتقال چهار الکترون محدود شده است. حفره های تولید شده در سطح نیمه رسانا آب را اکسید می کنند تا اکسیژن تولیـد کننـد، در حالي كه الكترون، پروتونها را كاهش ميدهد تا هيدروژن بسازد. بنابراین، یک فوتوکاتالیست کارآمد برای تقسیم آب باید ویژگی هایی را داشته باشد. برای تولید حامل بار باید فاصله باندی بیش از ۱٫۲۳ eV داشته باشد اما برای استفاده موثر از تابش خورشیدی کمتر از eV ۳ باشد. همچنین، موقعیتهای باند باید دارای حداکثر نوارهدایت مناسب (CBM) (PH=۰ در ۶.۶٤ eV) (CBM) نوارهدایت در pH=۷) با توجه به پتانسیل واکنش تکامل هیـدروژن (HER) و حداقل نوار ظرفیت (VBM) (o,77 Ev) در ۴ PH- در ۰ pHeV در pH = v) مطابق با واکنش تکامل اکسیژن (OER) باشـد. علاوه بر این، برای جلوگیری از نوترکیبی بار سطحی، حامل های تولید شده باید به سرعت منتقل شده و به طور موثر جدا شوند'. تاکنون، مواد متعددی به عنوان فوتوکاتالیست های شکافت آب معرفی شدند. در میان بسیاری از مواد پیشنهادی، تک لایـه β آنتیمونن دوپه شده و CuFOr "به عنوان یک فوتوکاتالیست بسیار کارآمد برای واکنش های تقسیم آب پیش بینی شدهاند. آنها بايد اصلاح يا توسعه يابند. همچنين، فتوكاتاليست هاى پيشرفته شامل فلزات نجیب گران قیمت یا اکسیدهای آنها هستند. تا به امروز، فلزات گرانبها مانند Pt و RuO<sub>Y</sub>/IrO به ترتیب به عنوان بهترين ماده الكتروكاتاليست براي HER و OER ثابت شده انـد. کاربرد صنعتی در مقیاس بزرگ آنها به دلیل کمیاب بودن، پایداری کم، هزینه بالا و ناسازگاری آنها در یک محلول الکترولیتی برای تقسيم آب به طور كلي همچنان ادامه دارد.

ترکیبات کالکوژنید علاوه بر فلزات و گروه -IV نیمه هادی هایی هستند که برای کاربرد در مواد مبدل انرژی یافت می شوند. ساختار آنها با کاتیونهای فلز قلیایی و آنیون های تیوستانات می تواند مزایای مواد فراوان، کم هزینه، سازگار با محیط زیست و غیر سمی را ارائه دهد. علاوه بر این، ترکیب (Q=S, Se) SnQ در ساختارشان آنها را به عنوان مواد نوری امیدوارکننده خوبی تبدیل

χ الکترونگاتیوی هر عنصر به توان ضریب استوکیومتری درترکیب و E<sub>a</sub> انرژی شکافت نوار می باشد.

بحث و نتیجه گیری

#### ساختار نوارى الكترونى

طبق جدول ۱، شکاف های باند با روش PBE, HSE و تجربی برای دو ساختار  $K_rNa_rSn_rS_h$  ( ۲,7۲ و ۲,۳۲ و ۱,۸۲ الکتر ون ولــــت) غيرمســـــتقيم و Rb<sub>r</sub>NaSn<sub>r</sub>Se<sub>۸</sub> و ۱٫۷٤ و ۱٫۷۷ و الكترون ولت) مستقيم ارائه شده است. شكاف نوار اندازه گيري شده تجربی بین مقادیر PBE و HSE قرار می گیرد که بیشتر به روش PBE نزیک است. بیش برآوردی روش HSE در بسیاری از اکسیدهای فلزی گزارش شده است<sup>°</sup>. این مقادیر برای کاربرد شکافت آب مناسب است. ساختار نـواری و چگـالی حالـت.هـای اوربیتال های اتمی دو ساختار در شکل ۱ نشان داده شده است. نتايج نشان ميدهد قلع و سولفور/سلنيم نقش اساسي در مشاركت لبههای نوار ایفا میکنند در حالیکه فلزات قلیایی سهم خیلی کمی دارند. سهم اتمها با پیوند آنها در ترکیبات مطابقت دارد، فلزات قلیایی الکترون هایشان را در پلی آنیون های کووالانس از دست دادهاند. حالتهای s و p سولفور و سلنیم در هر دو ترکیب نـوار ظرفیت و هدایت در برگرفته است. در هر دو ترکیب حالت ۵۶ قلع در نوار هدایت غالب است. در ساختار Rb نوار هدایت عمدتا شامل حالتهای ۵۶ قلع است که با اوربیتال p سلنیم هیبرید شده است. از سوی دیگر نوار ظرفیت توسط حالتهای اوربیتال p قلع اشغال شده است. سهم اتمهای سولفور و سلنیم، هیبریداسیون اتمهای قلع ویژگی برانگیختگی اطراف لبه های ظرفیت را مشخص میکند. ترکیب دارای پتاسیم با هیبریداسیون sp<sup>r</sup>d با کئوردیناسیون مثلث هرمی سهم اوربیتال های d نوار ظرفیت را نشان میدهد. بنابراین حالت اکسیداسیون قلع نقش مهمی در پهنای شکاف نوار ایف می کند. حالت های Sn-d در نوار ظرفیت RbrNaSnrSe، نیز منشأ و شدت تحریک را با KrNarSnrSe متفاوت می کند. بنابراین خواص الکترونیکی نیمه هادی های مورد مطالعه توسط پلي آنيون با پيوند كووالانسي كنترل مي شود.



جدول ۱. شکافت نوار با روش*های* PBE, HSE و تجربی

ساختار	تجربى	GGA	HSE
$K_{r}Na_{r}Sn_{r}S_{A}$	۲,۳۸	١,٨٢	۲,٦٢
Rb <sub>r</sub> NaSn <sub>r</sub> Se <sub>A</sub>	١,٧٤	١,٦٧	۲,۳۹

#### همترازی نوار

اگرچه داشتن شکاف نوار ایده آل پیش نیاز یک فوتوکاتالیست مناسب است، لبه نوار آنها نیز باید با پتانسیل کاهش آب همتراز باشد. شکل ۲همترازی این دو ساختار را با روش تقریبی تجربی و مدل اسلب نشان میدهد. موقعیت لبه نوار هر دو ترکیب در محدوده پتانسیل کاهش آب قرار می گیرد ولی ساختار دارای روبیدیم با شکاف نوار مستقیم برای شکافت آب نور مرئی توسط فرآیند دو فوتونی مناسب تر به نظر میرسد. در ساختار دارای پتاسیم شکاف نوار غیر مستقیم و پهن تر است.





خواص نورى

یک فوتوکاتالیست موثر همچنین باید جذب نور مرئی قوی، تحرک حامل بار بالا، تفکیک جفت الکترون-حفره تولید شده توسط نور را داشته باشد. در شکل ۳ طیف جذب نور میانگین این دوساختار نشان داده شده است. بزرگی ضریب جذب مستقیما به چگالی حالتها نزدیک لبههای نوار بستگی دارد. JDOS بزرگ بین نوارهای ظرفیت و هدایت نوار میانی قوی جذب نوری در این مواد را نشان میدهد. بنابراین طبق نمودار JDOS شکل ٤ چگالی حالتهای بالای لبه های نوار که از حالتهای اتم قلع و سولفور/سلنیم آمده است منجر به ضریب جذب بالای این دو ترکیب شده است.

همچنین، الکترون برانگیخته و حفره باید متحرک باشند و به سرعت به سطح برسند تا مولکول آب را کاهش و اکسایش دهند. تحرک حامل بار به طور معکوس به جرم موثر نوار بستگی دارد که خودش روی منحنی ساختار نواری در نظر گرفته میشود. همانطور که در جدول ۲ آمده است جرم موثر محاسبه شده برای مواد مطالعه شده به اندازه کافی کم است. علاوه براین جرم موثر الکترون در مقایسه با جرم موثر حفره، تفکیک حاملها به صورت الکترون برانگیخته به سرعت از حفره حرکت میکند و سرعت نوترکیبی بار را کاهش میدهد. سرعت نوترکیبی هم به طور معکوس با انرژی اتصال اکسایتون وابسته است که به صورت جذب بین یک الکترون و حفره آن تعریف میشود<sup>7</sup>.

$$E_{bind} = \frac{m_r R_H}{\varepsilon_{\infty}^2}$$

 $m_r$  جرم موثر کاهش یافته الکترون-حفره است،  $R_H$  ثابت ریدبرگ، و  $\infty$  ثابت دی الکتریک بزرگ برگ، و  $\infty$  ثابت دی الکتریک است. ثابت دی الکتریک بزرگ برهمکنش الکتروستاتیک کولمبی بین الکترون و حفره را ضعیف می کند. همانطور که در جدول مشاهده می شود مواد ثابت الکتریک بزرگی در مقایسه با مواد جاذب نور شناخته شده دارند $^{
m V}$ .

جدول ۱. ثابتهای دی الکتریک و جرمهای موثر نوار هر دوساختار

ساختار $arepsilon_{\infty}$ $m_h$ $m_e$
---

$K_{\tau}Na_{\tau}Sn_{\tau}S_{\Lambda}$	٥,١	٥,٢	۰ ,٤
$Rb_rNaSn_rSe_A$	٨, ٥	٥,١	۰,۲





نتيجه گيرى

در این پژوهش، با استفاده از محاسبات اصول اولیه خواص الکترونی و نوری مواد ۸، Rb<sub>r</sub>NaSn<sub>r</sub>Se, K<sub>r</sub>Na<sub>r</sub>Sn<sub>r</sub>S که به تازگی سنتز شده اند بررسی شده است. این دو ماده تمامی ویژگیهای مورد نیاز برای یک سیستم شکافت آب را دارد و شامل عناصر دوستدار محیط زیست و مقرون به صرفه میباشد.



بنابراین کاوش تجربی برای شکافت فوتوکاتالیستی آب توسط این مواد قابل تضمین است.

> مرجعها [

Singh, D.; Ahuja, R., Theoretical .Y prediction of a bi-doped  $\beta$ -antimonene monolayer as a highly efficient photocatalyst for oxygen reduction and overall water splitting. ACS applied materials & interfaces Y · Y ),  $YT(\xi V)$ ,  $\circ TY \circ \xi_{-}$ . $\circ TY T \xi$ 

Zhang, B.; Yu, H.; Hu, ;.Ji, X.; Wu, H .<sup>£</sup> Z.; Wang, J.; Wu, Y., Intriguing dimensional transition inducing variable birefringence in K<sup>T</sup>Na<sup>T</sup>Sn<sup>T</sup>S<sup>A</sup> and Rb<sup>T</sup>NaSn<sup>T</sup>Se<sup>A</sup>. *Inorganic* .*Chemistry* **T** • **T** • **(T**), **1** • 00-1 • **T**)

Solé, J.; Bausa, L.; Jaque, D., An .7 introduction to the optical spectroscopy of .inorganic solids. John Wiley & Sons: 7...o





# اثر نقص در خواص ترموالکتریکی نانونوارهای گرافنی با لبههای زیگزاگ نامتقارن در حضور

# برهمكنش الكترون–الكترون

مظهری موسوی ، فاطمه' ؛ فرقدان، روح اله'

<sup>ا</sup> دانشکده فیزیک دانشگاه کاشان، کیلومتر **۲** بلوار قطب راوندی، کاشان

#### چکید

ما در این بررسی به اثر نقص در خواص الکترونی و ترموالکتریک وابسته به اسپین نانونوارهای گرافنی با لبههای زیگزاگ نامتقارن پرداختهایم. در این کار از تقریب میدان موثر هابارد و روش تنگبست تکنواری برای محاسبه بخش الکترونی و همچنین از روش تابع گرین غیرخطی و مدل لاندائور-بوتیکر برای محاسبه ترموالکتریک وابسته به اسپین استفاده شده است. سیستم رفتار نیمرسانای اسپینی با نوارهای جایگزیده حول سطح فرمی به دلیل خواص مغناطیسی لبههای زیگزاگی و نقص موجود در لبه از خود نشان میدهد. با ایجاد اختلاف دما در دو سر سیستم، جریانهای گرمایی وابسته به اسپین یکسان با جهتهای مخالف، تولید می شود، که این منجر به جریان اسپینی نسبتا خالص میشود. جریانهای اسپینی القاشده گرمایی، وجود اثر سیبک وابسته به اسپین در این سیستم را تایید میکند و نتایج نیز یک اثر سیبک اسپینی نررگ را نشان میدهد.

واژه های کلیدی: نانونوارهای گرافنی، لبه های زیگزاگ نامتقارن، ترموالکتریک وابسته به اسپین، مدل میدان موثر هابارد، سیبک اسپینی

The Effects of defects on the thermoelectric properties of graphene nanoribbons with asymmetric zigzag edges in the presence of electron-electron interaction

Mazhari Mousavi, Fatemeh<sup>1</sup>; Farghadan, Rouhollah<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, University of kashan, kashan

#### Abstract

We investigated the effect of defect on the spin-dependent electronic and thermoelectric properties of graphene nanoribbons with asymmetric zigzag edge extensions. In this work, Hubbard mean-field approximation and single-band tight-banding method are used to calculate the electronic part, as well as the non-equilibrium Green's function method, and the Landauer-Buttiker formalism to calculate spin-dependent thermoelectric. The results show that the spinsemiconducting behavior with localized band structures is due to the magnetic properties of the zigzag edge extensions. By creating a temperature difference at the two ends of the system, spin-dependent heat currents are generated in opposite directions, which leads to a relatively pure spin current. Thermally-induced spin currents confirm the existence of a spindependent Seebeck effect in this system and the results also show a large spin-Seebeck effect.

*Keywords*: graphene nanoribbons, asymmetric zigzag edge extensions, thermoelectric properties, Hubbard mean-field approximation, spin-Seebeck

#### *PACS No.* 70 - 72

داشت که به یک مشکل جدی تبدیل می شود [۱]. تبدیل گرمای دفع شده به انرژی الکتریکی از طریق اثر ترموالکتریک راه حل جالبی برای این مشکل است. ترموالکترونیک وابسته به اسپین یا اسپین کالریترونیک زمینه تحقیقاتی جدیدی است که از برهمکنش بین جریانهای اسپینی و گرمایی بهره می برد [۲،۳]. بسیاری از کارها در این زمینه نشان دادهاند که اسپین کالریترونیک طرحی قابل اجرا برای کمتر شدن مصرف انرژی در الکترونیک مقیاس مولکولی است [٤]. در سالهای اخیر، گرافن توجه زیادی را به خود جلب

مقدمه

اثر ترموالکتریک، یعنی تبدیل مستقیم اختلاف دما به ولتاژ الکتریکی و بالعکس، که در سالهای اخیر با توسعه الکترونیک و اسپینترونیک، ترموالکتریک توجه زیادی را به خود جلب کرده است. بسیاری از تحقیقات امروزه به منشا فیزیکی و کاربردهای بالقوه پدیدههای ترموالکتریکی پرداختهاند. در مدارهای سیلیکونی معمولی، کوچک کردن اندازه دستگاههای الکترونیکی در مقیاس مولکولی، به دلیل مصرف بالای انرژی اتلاف گرما را خواهیم





شکل۱: شماتیک دستگاه نانوالکترونیک طراحی شده از نانونوار گرافنی با لبههای زیگزاگ نامتقارن و دارای نقص در لبه.

کرده است، بیشتر به دلیل ساختار الکترونیکی متفاوت آن است [۷–٥]. مغناطش در لبههای زیگزاگ به دلیل حالتهای الکترونی است که نزدیک به لبه زیگزاگی قرار دارند [۸] و از این واقعیت به وجود میآید که تنها یکی از دو زیرشبکه گرافن در یک لبه زیگزاگ شرکت میکند، در نتیجه به تراز فرومغناطیسی ممانهای مغناطیسی حاصل کمک میکند.

در این تحقیق، ما اثر نقص در نانونوار گرافنی با لبههای زیگزاگ نامتقارن را به عنوان دستگاه نانوالکترونیک، در خواص الکترونی و ترموالکتریکی وابسته به اسپین، مورد بررسی قرار دادهایم. ابن نانونوار رفتار نیمهرسانای اسپینی از خود نشان میدهد. همچنین، ایجاد اختلاف دما، یک جریان اسپینی نسبتا خالص بدون اعمال هیچ گونه بایاس و یک ضریب سیبک اسپینی بزرگ تولید میکند.

## روش محاسبات

دستگاه نانوالکترونیک مورد مطالعه در شکل ۱ نشان داده شده است. برای بررسی خواص ترموالکتریک وابسته به اسپین دستگاه، از روش تنگبست تکنواری و روش تابع گرین غیرتعادلی و فرمولبندی لاندائور-بوتیکر استفاده کردیم. هامیلتونی کل به صورت زیر نوشته می شود:

(۱)  $H_{Tot} = H_{C} + H_{R} + H_{L} + H_{CL} + H_{CR}$  (۱) در عبارت (۱) HC هامیلتونی مربوط به ناحیه مرکزی دستگاه، HCL و HL هامیلتونی مربوط به اتصالات راست و چپ دستگاه و HCL و HCL جفتشدگی بین ناحیه مرکزی و اتصالات را توصیف میکند. این هامیلتونی ها شامل بر همکنش الکترون –الکترون هستند، در تقریب میدان موثر هابارد و مدل تنگبست، هامیلتونی هر بخش

را می توان به صورت زیر نوشت [۹]:  

$$H = -t_{0} \sum_{\langle i,j \rangle,\sigma} \exp \left[ -\beta \left( \frac{r_{i} - r_{j}}{a_{0}} - 1 \right) \right] \hat{c}^{\dagger}_{i,\sigma} \hat{c}_{j,\sigma} + u \sum_{i,\sigma} \langle \hat{n}_{i,\sigma} \rangle \left( \hat{n}_{i,\sigma} - \frac{1}{2} \langle \hat{n}_{i,\sigma} \rangle \right) \right]$$
(7)

در عبارت (۲)  $t_0 = 2.74 \text{eV}$  ، پارامتر جهش بین دو نزدیکترین  $\hat{c}_{j,\sigma}$  ،  $\hat{c}_{i,\sigma}^{\dagger}$  ، پارامتر جهش بین دو نزدیکترین همسایه و  $\hat{c}_{j,\sigma}$  ،  $\beta = 4.45$  و  $a_0 = 1.42 \text{A}^{\circ}$  و j e aand  $\hat{c}_{i,\sigma}$  ،  $\sigma = 1.42 \text{A}^{\circ}$  e ,  $\sigma = 1.42 \text{A}^{\circ}$  e , j e aand  $\hat{c}_{i,\sigma}$  )  $\sigma = 1.42 \text{A}^{\circ}$  e ,  $\sigma = 1.42 \text{A}^{\circ}$  e , j e aand  $\hat{c}_{i,\sigma}$  e ,  $\sigma = 1.42 \text{A}^{\circ}$  e ,  $\sigma = 1.42 \text{A}^{\circ}$  e , j e aand  $\hat{c}_{i,\sigma}$  e ,  $\sigma = 1.42 \text{A}^{\circ}$  e , j e aand  $\hat{c}_{i,\sigma}$  e ,  $\sigma = 1.42 \text{A}^{\circ}$  e ,  $\sigma = 1.42 \text{A}^{\circ}$ 

$$\begin{split} & (\pi) \\ & \tau_{\sigma}(\epsilon) = \mathrm{Tr}\Big[\Gamma_{\mathrm{L},\sigma}(\epsilon)G_{\sigma}^{\mathrm{R}}(\epsilon)\Gamma_{\mathrm{R},\sigma}(\epsilon)G_{\sigma}^{\mathrm{L}}(\epsilon)\Big] & (\pi) \\ & ($$

$$I_{\sigma} = \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} \tau_{\sigma}(\varepsilon) \Big[ f_L(\varepsilon, T_L) - f_R(\varepsilon, T_R) \Big] d\varepsilon, \qquad (\mathfrak{t})$$

در رابطه (٤)  $f_{L(R)}$  تابع توزیع فرمی-دیراک الکترود چپ (راست) و  $T_{L(R)}$  دمای مربوط به الکترود چپ (راست) است. جریان اسپینی خالص ( $I_s$ ) اختلاف بین جریانهای اسپین بالا و پایین ( $\downarrow I - I_{\uparrow}$ ) است و جریان بار ( $I_c$ ) برابر مجموع آنها ( $\downarrow I + I_{\downarrow}$ ) است. ضریب سیبک به صورت نسبت اختلاف ولتاژ القا شده گرمایی به اختلاف دمای بین الکترودها تعریف می شود:

$$\mathbf{S}_{\sigma}\left(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{T}\right) = \left(\frac{\Delta \mathbf{V}_{\sigma}}{\Delta \mathbf{T}}\right) = -\frac{1}{|\mathbf{e}|\mathbf{T}} \frac{\mathbf{L}_{1\sigma}\left(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{T}\right)}{\mathbf{L}_{0\sigma}\left(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{T}\right)} \tag{0}$$

ضریب سیبک اسپینی  $(S_s)$  و بار  $(S_c)$  به ترتیب با عبارات  $S_s = (S_{\uparrow} - S_{\downarrow})/2$  و  $S_s = (S_{\uparrow} - S_{\downarrow})/2$  محاسبه می شوند. بحث و نتایج

در دستگاه نانوالکترونیک طراحی شده در این کار، ناحیه کانال و هر دو الکترود چپ و راست، ساختارهای مشابهی دارند. سلول واحد در این دستگاه یک ساختار دندان اره مانند است که دارای لبههای زیگزاگ نامتقارن است، این ساختار به صورت تجربی در آزمایشگاه ساخته شده است [۱۱]. در ناحیه مشخص شده در لبه (دایره با خط-نقطه سبز) نقص ایجاد شده است، که در شکل ۱ نشان داده شده است. وجود لبههای زیگزاگی و نقص در ساختار، تعادل بین زیرشبکههای A و B را از بین می برند به طوری که منجر به ایجاد گشتاور مغناطیسی خالص برابر با ٤ مگنتونبوهر در هر سلول واحد می شود، که مطابق با قضیه لیب

در شکل۲، ساختار نواری و ضریب عبور وابسته به اسپین را بررسی میکنیم. نتایج ساختار نواری در شکل۲ (الف) نمایش داده شده است. همانطور که می توان دید، این ساختار دارای رفتار نیمهرسانای مغناطیسی با نوارهای جایگزیده در نزدیکی سطح فرمی در بازه ۹/۰ تا ۹/۰- در گاف اسپینی، است. در اطراف سطح فرمی هشت نوار جایگزیده وجود دارد، قبل از ایجاد نقص در لبه به علت مغناطش در لبه های زیگزاگ ما شاهد چهار نوار جایگزیده در ساختار نواری بودیم [۱۰] اما ایجاد نقص موجب افزایش تعداد نوارهای جایگزیده در نزدیکی سطح فرمی شده است <mark>که روی</mark> <mark>شکل نشان داده شده است</mark>. بنابراین ما دستگاهی طراحی کردیم که می تواند ویژگی ترموالکتریکی خوبی از خود نشان دهد. از این هشت نوار انرژی جایگزیده حول سطح فرمی، چهار نوار با اسپین بالا (٢) و زیر سطح فرمی (خط قرمز)، و چهار نوار با اسپین پایین () بالای سطح فرمی قرار دارند (خط-نقط، آبی). نوارهای جایگزیده مربوط به حالت های اسپین بالا و پایین متقارن هستند. ضريب عبور الکترونی وابسته به اسـپين ( ۲<sub>۲</sub> و <sub>↓</sub>T ) متناسـب بـا نوارهای انرژی در شکل ۲ (ب) نمایش داده شده است. خواص



شکل۲ : الف) ساختار نواری وابسته به اسپین، ب) ضریب عبور الکترونی وابسته به اسپین، برای نانونوار گرافنی با لبه زیگزاگ نامتقارن و نقص در لبه.

نیمهرسانایی در این نمودار نیز دیده می شود.  $\tau$  و  $\tau$  تقریباً متقارن هستند و قلههای جایگزیده برای هر دو حالت اسپین (بالا و پایین) در اطراف انرژی فرمی به دست آمده است. دلیل این قلهها وجود نوارهای انرژی جایگزیده است، که در افزایش ضریب سیبک مؤثر هستند. نمودار ضریب عبور الکترونی، تابعی پلهای است، پلههای کامل در نمودار نشان دهنده این است که الکترودها و کانالها یکسان هستند و این رفتار در نانوپولکها مشاهده نمی شود. تقارن بالا بین  $\tau$  و  $\tau$  منجر به ایجاد جریان متقارن اسپینی و در نتیجه تولید جریان گرمایی اسپینی خالص می شود.

در ادامه یک اختلاف دما بین الکترود چپ و راست ایجاد کردیم ( $T_L - T_R = \Delta T$ )، که منجر به ایجاد جریان گرمایی وابسته به اسپین در سیستم شد. در شکل ۳ نمودار جریان گرمایی وابسته به اسپین را داریم. همانطور که از ضریب عبور پیش بینی شده، جریانهای اسپینی بالا ( $_1$ ) و پایین ( $_1$ ) تقریبا متقارن هستند که در شکل ۳ (الف) نشان داده شده است. بنابراین، ما یک جریان اسپینی تقریبا خالص ( $_s$ ) و یک جریان بار کوچک ( $_s$ ) برای همه Tکها داریم که در شکل ۳ (ب) مشاهده می شود. از شکل ۳ (الف) می توان دید که  $_1$  و  $_1$  در جهت مخالف جریان می یابند و با افزایش دما در Tکهای مختلف، افزایش می یابند.



شکل۳: الف) جریانهای وابسته به اسپین مI و J، ب) جریان اسپینی خالص . و بار خالص  $I_{
m c}$ ، بر حسب دما و در  $\Delta T$ های مختلف  $I_{
m s}$ 

ساختار برابر با ۱۹۰ کلوین است. وجود جریان گرمایی وابسته به اسپین، گاف اسپینی و تابع پله مانند ضریب عبور الکترونی در اطراف انرژی فرمی می تواند یک ضریب سیبک اسپینی بزرگ ایجاد کند.

نمودار ضرایب سیبک در دمای اتاق و برحسب یتانسیل شیمیایی (μ) در شکل ٤ ارائه شده است. بیشینه مقدار قدرمطلق برای سیبک



شکل٤: ضرایب سیبک اسپینبالا و پایین ۲ٍS، ای S، اسپینی خالص S، و بار S.

اسیینی بالا <sub>↑</sub>S و پایین <sub>۱</sub>.S به ترتیب برابر ۱.۷ و mV/K است. ضريب سيبک اسپينی خالص  $\mathbf{S}_{\mathrm{s}}$  در ناحيه گاف اسپينی به دليل تغییر خطی <sub>↑</sub>S و <sub>ل</sub>S در این ناحیه کاملاً صاف است و بیشترین مقدار قدرمطلق سیبک اسپینی خالص ( $\left|\mathbf{S}_{\mathrm{s}}\right|$ ) حدودا ۲.۲ mV/K مقدار قدرمطلق سیبک اسپینی خالص ( است. این مقدار قابل مقایسه با مقادیر گزارش شده برای سایر نانوساختارهای گرافنی است [۱۱]. زمانی که مS غالب است علامت  $S_{\rm c}$  و  $S_{\rm c}$  یکسان است اما وقتی  $S_{\rm t}$  غالب است علامتشان مخالف است.

نتيجه گيرې

در این کار اثر نقص در نانونوار گرافنی با لبه های زیگزاگ نامتقارن در حضور برهمکنش الکترون–الکترون مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان میدهند که علاوه بر لبههای زیگزاگ، نقص نیز موجب خاصیت مغناطیسی سیستم و ایجاد نوارهای جایگزیده در نزدیکی سطح فرمی و در گاف اسپینی میشود. نتایج همچنین نشان دهنده رفتار نیمرسانای اسپینی این نانونوارها هستند. که با اعمال یک اختلاف دما در دو سر سیستم یک جریان گرمایی وابسته به اسيين توليد مي شود و نشان دهنده وجود اثر سيبک اسپینی در این سیستم است. این نتایج نشان میدهند که استفاده از این نانونوارها برای ترموالکتریک و اسپینترونیک میتواند بسیار مفيد باشد.

مرجعها

- [1] T. T. Phùng, R. Peters, A. Honecker, G. T. de Laissardiere, J. Vahedi; "Spin-caloritronic transport in hexagonal graphene nanoflakes"; *Phys. Rev.*
- B, 102(3), (2020). [2] K. Uchida, S. Takahashi, K. Harii, J. Ieda, W. Koshibae, K. Ando, S. Maekawa, and E. Saitoh, "Observation of the spin Seebeck effect"; *Nature* (London) 455, 778 (2008).
- [3] H. Adachi, K. Uchida, E. Saitoh, and S. Maekawa; "Theory of the spin Seebeck effect"; *Rep. Prog. Phys.* 76, 036501 (2013).
  [4] G. E. W. Bauer, E. Saitoh, and B. J. van Wees; "Spin caloritronics"; *Nat. Mater.* 11, 391 (2012).
- [5] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim; "The electronic properties of graphene", *Rev. Mod. Phys.* 81,
- 109 (2009).
- [6] S. Das Sarma, S. Adam, E. H. Hwang, and E. Rossi; "Electronic transport in two-dimensional graphene"; *Rev. Mod. Phys.* 83, 407 (2011).
- [7] K. S. Novoselov, V. I. Fal'ko, L. Colombo, P. R. Gellert, M. G. Schwab, and K. Kim; "A roadmap for graphene"; *Nature (London)* **490**, 192 (2012).
- [3] L. Brey and H. A. Fertig; "Electronic states of graphene nanoribbons studied with the Dirac equation"; *Phys. Rev. B* 73, 235411
- (2006). [9] F. M. Mousavi, R. Farghadan; "Electrical control of the spin-Seebeck [9] F. M. MOUSAVI, K. Farghadan; "Electrical control of the spin-Seebeck coefficient in graphene nanoribbons with asymmetric zigzag edge extensions. PCCP (2022).
  [10] D. J. Rizzo, G. Veber, J. Jiang, R. McCurdy, T. Cao, C. Bronner, T. Chen, S. G. Louie, F. R. Fischer and M. F. Crommie; "Inducing metallicity in graphene nanoribbons via zero-mode superlattices"; *Science*, 369, 6511 (2020).
  [11] M. Shirdel Hener and P. Farrieder, "C. P. State and M. S. Carlos and M. S. Carlos and M. S. Science, 369, 6511 (2020).

- [11] M. Shirdel-Havar and R. Farghadan, "Spin caloritronics in spin emiconducting armchair graphene nanoribbons" *Phys. Rev. B*, 97, 235421 [11] M. (2018).



با سلام و تشکر از داوران محترم برای سوال بسیار خوبی که مطرح کردند. توضیحات لازم در شکل و متن به صورت هایلایت ارائه شده است.



# مدلسازی ترانزیستور اثر میدانی مبتنی بر نانوساختارهای نامتجانس جانبی مولیبدن دی سولفاید در

سطح پيوسته

سلامی ، نادیا<sup>۱</sup> ؛ شکری، علی اصغر<sup>۲</sup> <sup>ا</sup> گروه فیزیک، واحد یاسوج، دانشگاه آزاد اسلامی ، یاسوج، ایران ۲ گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور ، ص.پ. ۲۶۹۷–۱۹۳۹۵، تهران

۳ گروه نانوفیزیک، دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا ، تهران

#### چکیدہ

در این مقاله، شبیه سازی سه بعدی نانوترانزیستور اثر میدانی مبتنی بر نانوساختارهای نا متجانس جانبی مولیبدن-دی سولفاید با استفاده از ماژول نیمه هادی در نرم افزار کامسول ارائه شده است. با استفاده از حل معادلات رانشی-پخشی و حل معادله پواسون، مشخصه های جریان الکتریکی بر حسب ولتاژ سورس- درین و همچنین بر حسب ولتاژ درگاهی به دست می آوریم. در این مقاله چند مدل متفاوت نانوترانزسیتور اثر میدانی با ماده فعال تک لایه مولیبدن دی سولفاید، چهارلایه مولیبدن دی سولفاید، اتصال چهارلایه-تک لایه و اتصال تک لایه – چهار لایه – تک لایه بررسی می شود.

**واژه های کلیدی**: نانوترانزیستور اثر میدانی، نانوساختارهای نامتجانس جانبی مبتنی بر مولیبدن دی سولفاید، شبیه سازی در تراز پیوسته، کامسول، معادله رانشی-پخشی

## Modeling of Field Effect Transistors Based on Molybdenum Disulfide Lateral Heterojunctions in continuum level

#### Salami, Nadia<sup>1</sup>; Shokri, AliAsghar<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Yasuj Branch, Islamic Azad University, Yasuj, Iran
 <sup>2</sup> Department of Physics, Payame Noor University, Tehran
 <sup>3</sup> Department of Nanophysics, Faculty of Physics, Alzahra University, Tehran, 1953833511, Iran

#### Abstract

In this paper, the 3D continuum simulation of nano-transistors based on the MoS<sub>2</sub> nanostructures is presented using the full wave solver (COMSOL). The current characteristics are evaluated with respect to the sourcedrain voltage and also gate voltage using drift-diffusion equations and poison equations. In this paper, some models of filed effects nano-transistors based on the monolayer, four layers, four layers/monolayer and monolayer/four layer/monolayer are studied.

*Keywords*: Field-Effect Nano Transistor, Lateral Heterojunction based on MoS<sub>2</sub>, Simulation in Continuum level, COMSOL, Drift-Diffusion equation PACS No.

مقدمه مقدمه در دو دهه اخیر، به دلیل ویژگی های منحصر به فرد مواد دوبعدی با گاف نواری قابل توجه و انعطاف پذیری بالا است که دوبعدی به ضخامتی در حدود مقیاس اتمی، بررسی های بسیاری بر در طراحی ادوات اپتوالکترونیکی، الکترونیکی، حسگرهای زیست

فناوری و گازی و همچنین به عنوان روانکننده کاربرد دارد [۱]. از طرفی دیگر به منظور طراحی ترانزیستورهای اثر میدانی با عملکرد بالا ، مولیبدن دی سولفاید به عنوان لایه فعال، بسیار بررسی و مطالعه شده است [۲-۳]. شبیه سازیها میتوانند تا حد زیادی در هزینه و زمان صرفه جویی کنند. در این مقاله به شبیه سازی و مطالعه نانوترانزیستورهای اثر میدانی میدانی با ماده فعال تک لایه مولیدن دی سولفاید، چهارلایه مولیبدن دی سولفاید، اتصال چهارلایه-تک لایه مولیبدن دی سولفاید و اتصال تکلایه-چهار لایه-تکلایه مولیبدن دی سولفاید با استفاده از مدل نیمه کلاسیکی رانشی - پخشی می پردازیم.

نرود طلا سولفايد_	الک تک لايه موليبدن دي	چهار لايه موليبدن دي سولفايد	الکترود طلا تک لایه مولیبلدن دی سولفاید
		دى اكسيد سيليسيوم	
		سیلیسیوم از نوع دهنده	

شکل ۱ : تصویر شماتیکی مدل ترانزیستور اثر میدانی مبتنی بر مولیبدن دی سولفاید. الکترودهای طلا به عنوان سورین و درین، سیلسیوم دهنده به عنوان گیت پشتی، دی اکسید سیلسیوم به عنوان ماده عایق و مولیبدن دی سولفاید ماده فعال ترانزیستور اثرمیدانی است.

# روش محاسباتی

وسیله مورد نظر ما در شبیه سازیها، ترانزیستور اثرمیدانی با الکترودهای طلا و زیرلایه دیاکسیدسیلیسیوم، گیت پشتی سیلیسیوم از نوع دهنده و ماده فعال بر پایه نانوساختارهای مولیبدن دی سولفاید است. به طور جزئی تر، ماده فعال شامل تک لایه، چهار لایه، اتصال افقی چهار لایه/ تک لایه با طول های مساوی و اتصال افقی تکلایه/ چهارلایه/ تکلایه با طول های مساوی مولیبدن-دی سولفاید است (مطابق شکل ۱). مقادیر پارامترهای هندسی در جدول ۱ ارایه شده است.

ماژول فیزیک نیمه هادی، معادله پواسون را به کار می گیرد که چگالی بار ho را به پتانسیل الکتریکی V مرتبط می کند:

مدل ماده نیمه هادی به کار گرفته می شود تا معادلات برای مواد نیمه هادی از مدل نیمه کلاسیکی به دست آید. یونیزاسیون کامل برای ناخالصی ها در نظر گرفته می شود. به این ترتیب بار موجود در ماده فعال از چگالی اتمهای دهنده و گیرنده و چگالی الکترون-ها و حفرهها به دست می آید. هر دو چگالی الکترون و حفره در معادله پيوستگي به ترتيب مطابق با رابطه abla = 
abla .و صدق می کند. جریان های حامل ها مطابق معادلات  $abla .J_p = 0$ رانشی – پخشی محاسبه می شوند. لبه نوار رسانش و نوار ظرفیت با استفاده از گاف نواری، الکترون خواهی و پتانسیل اعمالی به دست می آیند. در مولفه جریان پخشی، دمای اتاق در نظر گرفته شده است. پتانسیل اهمی برای اتصال های سورس، درین و درگاهی در نظر گرفته می شود. معادله پیوستگی بار برای بردار میدان الکتریکی و بردار جابجایی مطابق با قانون گاوس برای عایق ها به عنوان مواد دي الكتريك در نظر گرفته مي شود. مدل آلايش تحلیلی برای تعیین نوع آلایش و چگالی آن در کانال (ناحیه فعال) در نظر گرفته می شود. فرایند بازترکیب الکترون–حفره به کمک تلههایی می تواند در چگالی جریان سهم داشته باشد.



شکل ۲ : نمودارهای جریان بر حسب a) ولتاژ سورس-درین، b) ولتاژ درگاهی تک لایه مولیبدن-دی سولفاید.







شکل ۳ : نمودارهای جریان بر حسب a) ولتاژ سورس-درین، b) ولتاژ درگاهی چهارلایه مولیبدن-دی سولفاید.

در این کار، مدل شاکلی-رید-هال استفاده می شود  $abla . J_n = qR_n$  و abla . 
abla . 
abla . 
bla . 
bla

مقادیر استفاده شده در شبیه سازی در جدول ۱ آمده است.

## نتایج عددی و توصیف آنها

به منظور اعتبارسنجی نتایج در مرحله اول، مشخصه جریان بر حسب ولتاژ سورس-درین به ازای  $V_g = 10V$  همچنین مشخصه جریان بر حسب ولتاژ درگاهی به ازای  $V_d = 0.05V$  همچنین چهار لایه برای هر ترانزیستور با ماده فعال تک لایه و همچنین چهار لایه محاسبه شدند که با نتایج نظری و آزمایشگاهی همخوانی دارد [۲ و ۵]. محاسبات به ازای سه مقدار متفاوت از غلظت دهندهها در ناحیه فعال انجام می شود. به منظور مقایسه با یافته های



شکل ۴ : نمودارهای جریان بر حسب a) ولتاژ سورس-درین، b) ولتاژ درگاهی تک لایه/چهارلایه مولیبدن-دی سولفاید.

ساختارهای در نظر گرفته شده در این مطالعه، نتایج در شکلهای ۲ و ۳ ارائه می شوند.

نتایج شکل ۲ نشان می دهد که سیستم در ناحیه خطی رفتار اهمیک نشان می دهد که در نتیجه اتصال اهمیک الکترودها به تک لایه مولیبدن-دی سولفاید اتفاق می افتد. از طرفی دیگر پاسخ یکنواختی در سیستم مشاهده می شود که نشان دهنده این است که پراکندگی ها توسط ناخالصیها در ناحیه فعال به طور یکنواخت اتفاق می افتد. علاوه براین، نتایج نشان میدهند که با افزایش غلطت حاملها در ماده فعال، جریان بیشتر و در نتیجه سیستم، مقاومت کمتری از خود نشان می دهد. شبیه سازیها نشان میدهند که به طور کیفی، ترانزیستور مبتنی بر چهارلایه مولیبدن-دی سولفاید پاسخ مشابهی با مورد تک لایه نشان می دهد (شکل ۳ را ببینید). این در حالی است که مطابق انتظار، چهار لایه مولیبدن-دی سولفاید در شرایط مشابه، جریان بیشتری نسبت به تک لایه از خود نشان می دهد.

در مرحله بعدی، شبیه سازیهای وسیله با ماده فعال شامل اتصال افقی چهار لایه/تک لایه با طول های مساوی مولیبدن-دی سولفاید انجام میشود. مشخصه های جریان الکتریکی بر حسب ولتاژ سورس-درین و همچنین ولتاژ درگاهی به ازای سه غلظت متفاوت ماده دهنده در شکل ۴ ارائه شده است. شبیه سازیها نشان می دهند که سیستم پاسخ نامتقارنی از خود نشان می دهد که به واسطه ماده فعال نامتقارن و پراکندگی غیر یکسان حاملها در آنها اتفاق می افتد. علاوه بر این، پاسخ سیستم وابسته به ولتاژ درگاهی و غلظت حاملها است.

در انتها، نتایج شبیه سازیهای وسیله با ماده فعال شامل اتصال افقی تک لایه/ چهار لایه/ تک لایه با طول های مساوی مولیبدن-دی سولفاید در شکل ۵ ارائه می شود. مشخصههای جریان الکتریکی بر حسب ولتاژ سورس-درین و همچنین ولتاژ درگاهی به ازای سه غلظت متفاوت ماده دهنده در شکل ۴ ارائه شده است. نتایج نشان میدهند، این وسیله در شرایط مشابه مقدار جریان سورس-درین بیشتری نسبت به وسیله با ماده فعال چهار لایه/تک لایه از خود نشان می دهد.

۵].	۳ و	[۲،	سازى	شبيه	در	گرفته	نظر	در	های	پارامتر	:	دول ۱	<i>ج</i>
-----	-----	-----	------	------	----	-------	-----	----	-----	---------	---	-------	----------

پارامتر	مقدار	پارامتر	مقدار
ضخامت مولیبدن دی سولفاید به ازای هر لایه	•.Vnm	دما	797.10 K
ضخامت الكترود طلا	۵·nm	پهنا	۶∧• nm
ضخامت دي اکسيد سيليسيوم	r•• nm	طول وسيله	та nm
ضریب تحرک پذیری الکترون و حفره برای تک لایه (چهارلایه) مولیبدن–دی سولفاید		تابع کار گیت	4.•0 V
گذردهی نسبی دی اکسید سیلیسیوم	۳.۹	تابع کار طلا	۵.۱۷
گذردهی نسبی تک لایه (چهار لایه) مولیبدن-دی سولفاید	4.7 (11)	ضخامت سيليسيوم	۲۰۰۰ nm
گاف نواری تک لایه (چهار لایه)	۲.V9 (1.9) eV	جرم موثر حفره و الکترون	•.cm0
الکترونخواهی تک لایه (چهار لایه) مولیبدن-دی سولفاید	۴.۷ (۴.۰) eV	نيمه عمر الكترون و حفره	۱.۵ <i>ns</i>



شکل ۵ : نمودارهای جریان بر حسب a) ولتاژ سورس-درین، b) ولتاژ درگاهی تک لایه/چهارلایه/تک لایه مولیبدن-دی سولفاید.

نتيجه گيرى

شبیه سازی و مطالعه نیمه کلاسیکی ارایه شده در این مقاله پاسخ نانوترانزیستورهای اثر میدانی با ماده فعال تک لایه مولیبدن دی سولفاید، چهارلایه مولیبدن دی سولفاید، اتصال چهارلایه-تک لایه مولیبدن دی سولفاید و اتصال تکلایه-چهار لایه-تکلایه مولیبدن دی سولفاید در مقیاسهای قابل مقایسه با ادوات تجربی را ارائه می دهد.

مرجعها

- [1] A. Shokri and N. Salami "Gas sensor based on MoS<sub>2</sub> monolayer"; Sensors and actuators B 236 (2016) 378-385.
- [Y] B. Radisalvljevic, A. Radenovic, J. Brivio, V. Giacometti and A. Kis, "Single-layer MoS<sub>2</sub> transistor"; *Nature Nanotechnology* 6 (2011) 147-150.
- [r] S. L. Howel, and et. al. "Investigation of Band-offsets at Monolayer-Multilayer MoS<sub>2</sub> Junctions by Scanning Photocurrent Microscopy"; *Nano Letters* 15 (2015) 2278-2284.
- [Y] S. M. Sze and K. K. Ng "Physics of Semiconductor Devices"; John Wiley & Sons (2007).
- [۵] N. Pelagalli, E. Laudadio, P. Stipa, D. Mencarelli and L. Pierantoni, "Efficient and Versatile Modeling of Mono- and Multi-Layer MoS2 Field Effect Transistor"; *Electronics* 9, No. 9 (2020) 1385

# در هم تنیدگی در یک سیستم دو کیوبیت بار جفت شدهی ناهمسان در حضور نوسانات کوانتومی حسینی، سید محمد<sup>۱،\*</sup>؛ نوروَزی، میلاد<sup>۲</sup>؛ سیدیزدی، جمیله<sup>۲،\*</sup>؛ ایراننژاد، فاطمه<sup>۲</sup>

<sup>۱</sup> گروه فیزیک، دانشکاه علوم، دانشگاه ارومیه، ارومیه ۲ گروه فیزیک دانشگاه ولیعصر (عج) رفسنجان

#### چکيده

از آنجاییکه مجموعهای از کیوبیتهای جغتشاده (سیستمهای کوانتومی دو ترازی جفتشاده) در ساخت کامپیوتر و تقویت کنندهای پارامتریک جوزفسون بسیار حائز اهمیت هستند. لذا در این کار، رفتار کیفی درهمتنیدگی کوانتومی برای یک سیستم دو کیوبیت بار جفتشادهی ناهمسان در حضور نوسانات کوانتومی که با استفاده از تکنیک پالس رخ میدهند، بررسی میشود. بر اساس این ملل، کیوبیتها در طول نوسانات، درهمتنیده میشوند و ما این درهمتنیدگی را برای انرژیهای جوزفسون، انرژیهای جفتشادگی مختلف، و دماهای مختلف مورد ارزیابی قرار میدهیم. در ادامه راهکارهایی برای تقویت درهمتنیدگی در این سیستمها بمنظور بهبود عملکرد کامپیوترها و رادارهای کوانتومی ارائه میگردد. علاوه بر این، با استفاده از این مدل میتوان انواع تستها را برای یک نوسانهای کوانتومی حتی در دمای اتقاق یعنی ۲۰۰ کلوین با حفظ درهمتنیدگی، انجام داد.

**واژههای کلیدی**: درهمتنیدگی کوانتومی، کیوبیت، نوسانات کوانتومی، کانکارنس.

# Entanglement in a two dissimilar coupled charge qubits system in the presence of quantum oscillations

Hosseiny, Seyed Mohammad<sup>1,\*</sup>; Norouzi, Milad<sup>2</sup>; Seyed-Yazdi, Jamileh<sup>2,\*</sup>; Irannejhad, Fatemeh<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, University of Urmia, Urmia <sup>2</sup> Department of Physics, Vali-e-Asr University of Rafsanjan

#### Abstract

A set of coupled qubits (coupled two-level quantum systems) are very important in building computers and parametric Josephson amplifiers. Therefore, in this work, the qualitative behavior of quantum entanglement for a two dissimilar coupled charge qubits system is investigated in the presence of quantum oscillations that occur using the pulse technique. According to this model, qubits become entangled during oscillations, and we evaluate this entanglement for different Josephson energies, coupling energies, and temperatures. In the following, solutions are presented to amplify the entanglement in these systems to improve the performance of computers and quantum radars. In addition, using this model, a variety of tests can be performed for a coupled two-qubit system in the presence of quantum oscillations even at room temperature of 300 K while maintaining entanglement.

Keywords: Quantum entanglement, Qubit, Quantum oscillations, Concurrence.

PACS No. 74 در میان انواع کیوبیتهای پیادهسازیشده، کیوبیتهای حالت جامد<sup>4</sup> [۶ و۷] به دلیل ادغامپذیریشان<sup>۵</sup> از اهمیت ویژهای برخوردار

<sup>2</sup> A set of coupled two-level quantum systems

<sup>3</sup> Qubits

<sup>4</sup> Solid-state qubits

<sup>1</sup> Quantum computer

یک کامپیوتر کوانتومی [[-۴]، از مجموعهای از سیستمهای

کوانتومی دو ترازی جفتشده (کیوبیتها) تشکیل می شود [۵].

مقدمه


$$H = \begin{pmatrix} E_{00} & -\frac{1}{2}E_{J1} - \frac{1}{2}E_{J2} & 0\\ -\frac{1}{2}E_{J1} & E_{01} & 0 & -\frac{1}{2}E_{J2}\\ -\frac{1}{2}E_{J2} & 0 & E_{10} & -\frac{1}{2}E_{J1}\\ 0 & -\frac{1}{2}E_{J2} - \frac{1}{2}E_{J1} & E_{11} \end{pmatrix}$$
(1)

بطوریکه  $E_{J1}, E_{J2}$  انرژی جفتشدگی جوزفسون کیوبیت اول و دوم است. همچنین انرژی الکترواستاتیکی کل سیستم برابر است با:  $E_{n1n2} = E_{c1} (n_{g1} - n_1)^2 + E_{c2} (n_{g2} - n_2)^2$ (۲)  $+ E_m (n_{c1} - n_1) (n_{c2} - n_2)$ 

که در آن  $E_{c1}, E_{c2}$  انرژی شار جوزفسون کیوبیت اول و دوم،  $(n_1, n_2 = 0, 1)$  تعداد جفت کوپر در جعبه اول و دوم<sup>۷۷</sup>, دوم،  $(n_1, n_2 = 0, 1)$  تعداد جفت کوپر در جعبه اول و دوم<sup>۷۷</sup>,  $n_{g1}, n_{g2}$  بارهای نرمالیزه القاء شده بر روی دو کیوبیت ابررسانای مربوطه است و  $E_m$  انرژی جفت شدگی است. در اینجا کیوبیت ها، شرایط نقطه تبهگن<sup>۸۸</sup> را تصدیق میکنند، یعنی 5.5 =  $n_{g1} = n_{g2}$  و شرایط نقطه تبهگن<sup>۸۸</sup> را تصدیق میکنند، یعنی 5.5 =  $n_{g1} = n_{g2}$  و آدیاباتیک  $E_{10} = E_{10}$  هنگامی که سیستم به صورت غیر آدیاباتیک <sup>۹۹</sup> به نقطهی 5.5 =  $n_{g1}$  یا 5.5 =  $n_{g2}$  تحریک می شود، مانند یک کیوبیت منفرد بین حالتهای تبهگن نوسان میکند [۵].



شکل ۱: مدار معادل یک سیستم دو کیوبیت جفت شده توسط خازن Cm.

در تعادل گرمایی <sup>۲۰</sup> ماتریس چگالی  $\rho(T)$  برای سیستم دو کیوبیت ابررسانا برحسب ویژه مقادیر  $|\psi_n\rangle$  و ویژه بردارها  $\langle\psi_n|$  را میتوان به صورت زیر نوشت [۲۵]:

$$\rho(T) = \frac{1}{z} e^{-\beta H} = \frac{1}{z} \sum_{n} e^{-\beta \epsilon_{n}} |\psi_{n}\rangle \langle\psi_{n}|, \qquad (\gamma)$$

<sup>20</sup> Thermal equilibrium

هستند. نمونهای از این کیوبیتهای ابررسانا، کیوبیتهای اتصال جوزفسون<sup>2</sup> [۸–۱۰] هستند. مدارهای اتصال جوزفسون، پتانسیلهای زیادی برای بکارگیری در انواع سیستمهای کوانتومی دارند که میتوان گفت یک مدل آرمانی برای کامپیوترهای کوانتومی و تقویتکنندههای پارامتریک جوزفسون<sup>۷</sup> (JPA) [–۱۴ (۱۱] میباشند. با استفاده از تکنیک پالس<sup>۸</sup> [۵]، میتوانیم به طور کوانتومی<sup>۹</sup> [۵–۱۷] را مشاهده کنیم که طیف آن اندرکنش بین کیوبیتها را بازتاب میکند. کیوبیتها در طول نوسانهای کوانتومی، درهمتنیده<sup>۱۱</sup> میشوند و این درهمتنیدگی<sup>۱۱</sup> بهدلیل کاربردهای فراوان آن، از جمله در رادارهای کوانتومی<sup>۱۲</sup> [۸–۲۰]

در این کار، با استفاده از ابزار قدرتمند کانکارنس (توافق)<sup>۱۴</sup> [۲۴]، درهمتنیدگی را برای یک سیستم از دو کیوبیت بار جفتشده در حضور نوسانات کوانتومی، محاسبه میکنیم.

#### مدل

دو کیوبیت بار را درنظر بگیرید که به صورت الکترواستاتیکی توسط یک خازن *Cm* روی تراشه جفت میشوند (شکل ۱). کیوبیت سمت راست دارای یک دستگاه تداخلی کوانتومی ابررسانا<sup>۱۵</sup> (SQUID) است تا امکان کنترل جفتشدگی جوزفسون به مخزن را فراهم آورد. هر دو کیوبیت دارای یک درگاه پالس مشترک<sup>۱</sup> هستند اما گیتها، پروبها و مخازن dc مجزا هستند. هامیلتونی سیستم در تقریب چهار ترازی در یک برهمنهی همدوس از چهار حالت دو کیوبیت بار {(11|,(10|,(10|,

<sup>5</sup> Integration

- <sup>6</sup> Josephson-junction qubits
- <sup>7</sup> Josephson parametric amplifier (JPA)
- <sup>8</sup> Pulse technique
- <sup>9</sup> Quantum oscillations
- <sup>10</sup> Entangled
- <sup>11</sup> Entanglement
- <sup>12</sup> Qunatum radars
- <sup>13</sup> Quantum illumination
- <sup>14</sup> Concurrence
- <sup>15</sup> Superconducting quantum interference device (SQUID)
- <sup>16</sup> Common pulse gate

<sup>&</sup>lt;sup>17</sup> Number of Cooper pairs in the first and second box

<sup>&</sup>lt;sup>18</sup> Degenerate point

<sup>&</sup>lt;sup>19</sup> Non-adiabatically

تفاوت این کار با کارهای گذشته از جمله [۲۵] در این است که در این کار از دو کیوبیت ناهمسان در سیستم استفاده شده است لذا درگاههای کیوبیت نیز متفاوت هستند اما در کارهای گذشته چنین نیست. همچنین در این کار بهدلیل استفاده از تکنیک پالس که ناشی از درگاههای متفاوت است نوسانات کوانتومی ظاهر میشود که درهمتنیدگی در حضور این نوسانات بررسی میشود. درهم تنیدگی کوانتومی یک سیستم دو کیوبیتی

اگر اندازه گیری<sup>۱۱</sup> روی کیوبیت اول، بر نتیجه یا اندازه گیری روی کیوبیت دوم تأثیر بگذارد، سیستم را درهم تنیده در نظر گرفته می شود، در غیر این صورت سیستم را یک سیستم جداپذیر<sup>۲۲</sup> می نامند. درهم تنیدگی یک سیستم دوبخشی<sup>۳۳</sup> به راحتی با اندازه گیری توافق (کانکارنس<sup>۲۴</sup>) تعین می شود [۲۴ و ۲۷]: (۴)  $, \{ \lambda_{V} - \sqrt{\lambda_{2}} - \sqrt{\lambda_{2}} - \sqrt{\lambda_{1}} + (0) \}$ (۴) که <sub>1</sub>  $\Lambda$  ویژه مقادیر ماتریس چگالی است. توافق حالتهای درهم تنیده حداکثر برابر با واحد است؛ که برای حالتهای جدایذیر، صفر می شود.

## بحث و نتايج

در شکل۲ رفتار کیفی درهمتنیدگی برحسب دما با انرژی جفتشدگی E<sub>m</sub> و انرژی جوزفسون کیوبیت اول E<sub>JI</sub> مختلف ترسیم شده است.





<sup>22</sup> Separable

<sup>23</sup> Bipartite

<sup>24</sup> Concurrence

شکل ۲: رفتار کیفی درهمتنیدگی بر حسب دما T (کلوین) برای آ) انرژی جفت شدگی Em مختلف، ب) انرژی جوزفسون کیوبیت اول *H* مختلف. در شکل ۲ آ) با افزایش انرژی جفت شدگی، مشاهده می شود که درهم تنیدگی برای دماهای کمتر از ۲ کلوین کاهشی است اما برای دماهای بیشتر از ۲ کلوین افزایشی است و به هیچ عنوان درهم تنیدگی سرکوب نمی شود. لذا افزایش انرژی جفت شدگی در بسیار مفید است. همین رفتار نیز برای افزایش انرژی جوزفسونها قابل مشاهده است. علاوه بر این، در شکل ۲ ب) مشاهده می شود برای دماهای بسیار بالا (۱۰۰ الی ۲۰۰۰ کلوین)، درهم تنیدگی سرکوب نمی شود و حتی می توانیم با افزایش انرژی جفت شدگی یا انرژی جوزفسون آن را بهبود بخشید.

در شکل ۳ رفتار کیفی درهم تنیدگی برحسب انرژی جفت شدگی  $E_m$  برای انرژی جوزفسون کیوبیت دوم  $E_{J2}$  مختلف ترسیم شده است. در این شکل می بینیم برخلاف شکل ۲، با افزایش انرژی جوزفسون کیوبیت دوم، درهم تنیدگی کاهش می یابد. اما نکته ی بسیار مهم این است که زمانیکه انرژی جوزفسون کیوبیت اول و دوم مقداری نزدیک به هم دارند، درهم تنیدگی بیشینه است (ابتدای منحنی ها) اما زمانیکه این مقادیر تفاوت چشم گیری دارند، درهم تنیدگی کمینه است (انتهای منحنی ها). علاوه بر این، نتیجه یقابل تأمل این است که درهم تنیدگی سرکوب نمی شود.



شکل۳: رفتار کیفی درهمتنیدگی بر حسب انرژی جفتشدگی Em برای انرژی جوزفسون کیوبیت دوم EJ2 مختلف برای دمای یک کلوین.

شکل ۴ رفتار کیفی درهمتنیدگی برحسب انرژی جوزفسون کیوبیت دوم *E*<sub>J2</sub>، برای انرژی جوزفسون کیوبیت اول *E*<sub>J1</sub> های مختلف در دمای یک کلوین ترسیم شده است. در این شکل، با افزایش انرژی کیوبیت جوزفسون اول، درهمتنیدگی کاهش مییابد



- [A] Averin, D.V. Quantum computing and quantum measurement with mesoscopic Josephson junctions, *Fortschr. Phys.* 48, 1055-1074 (2000).
- [4] Makhlin, Yuriy, Gerd Scöhn, and Alexander Shnirman. "Josephsonjunction qubits with controlled couplings." *nature* 398, no. 6725 (1999): 305-307.
- [v] Osman, A., et al. "Simplified Josephson-junction fabrication process for reproducibly high-performance superconducting qubits." *Applied Physics Letters* 118, no. 6 (2021): 064002.
- [11] Macklin, Chris, K. O'brien, D. Hover, M. E. Schwartz, V. Bolkhovsky, X. Zhang, W. D. Oliver, and I. Siddiqi. "A nearquantum-limited Josephson traveling-wave parametric amplifier." *Science* 350, no. 6258 (2015): 307-310.
- [11] Winkel, Patrick, Ivan Takmakov, Dennis Rieger, Luca Planat, Wiebke Hasch-Guichard, Lukas Grünhaupt, Nataliya Maleeva et al. "Nondegenerate parametric amplifiers based on dispersion-engineered Josephson-junction arrays." *Physical Review Applied* 13, no. 2 (2020): 024015.
- [17] Rhák, M., P. Neilinger, M. Grajcar, G. Oelsner, U. Hübner, E. Il'ichev, and H-G. Meyer. "Parametric amplification by coupled flux qubits." *Applied Physics Letters* 104, no. 16 (2014): 162604.
- [14] White, T. C., J. Y. Mutus, I-C. Hoi, R. Barends, B. Campbell, Yu Chen, Z. Chen et al. "Traveling wave parametric amplifier with Josephson junctions using minimal resonator phase matching." *Applied Physics Letters* 106, no. 24 (2015): 242601.
- [16] Liu, Tianyu, D. I. Pikulin, and M. Franz. "Quantum oscillations without magnetic field." Physical Review B 95, no. 4 (2017): 041201.
- [19] Doiron-Leyraud, Nicolas, et al. "Quantum oscillations and the Fermi surface in an underdoped high-Tc superconductor." *Nature* 447, no. 7144 (2007): 565-568.
- [1V] Cooper, K. B., et al. "Observation of quantum oscillations between a Josephson phase qubit and a microscopic resonator using fast readout." *Physical Review Letters* 93, no. 18 (2004): 180401.
- [14] Lanzagorta, Marco. "Quantum radar." Synthesis Lectures on Quantum Computing 3, no. 1 (2011): 1-139.
- [14] Maccone, Lorenzo, and Changliang Ren. "Quantum radar." *Physical Review Letters* 124, no. 20 (2020): 200503.
- [Y•] Luong, David, Sreeraman Rajan, and Bhashyam Balaji. "Entanglement-based quantum radar: From myth to reality." *IEEE Aerospace and Electronic Systems Magazine* 35, no. 4 (2020): 22-35.
- [Y1] Tan, Si-Hui, Baris I. Erkmen, Vittorio Giovannetti, Saikat Guha, Seth Lloyd, Lorenzo Maccone, Stefano Pirandola, and Jeffrey H. Shapiro. "Quantum illumination with Gaussian states." *Physical review letters* 101, no. 25 (2008): 253601.
- [YY] Barzanjeh, Shabir, Saikat Guha, Christian Weedbrook, David Vitali, Jeffrey H. Shapiro, and Stefano Pirandola. "Microwave quantum illumination." *Physical review letters* 114, no. 8 (2015): 080503.
- [vv] Barzanjeh, Shabir, Stefano Pirandola, David Vitali, and Johannes M. Fink. "Microwave quantum illumination using a digital receiver." *Science Advances* 6, no. 19 (2020): eabb0451.
- [YY] W. K. Wootters, "Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits," *Physical Review Letters*, vol. 80, p. 2245, 1998.
- [Y0] El-Qahtani, Zainab MH, K. Berrada, S. Abdel-Khalek, and H. Eleuch.
   "Thermal Fisher information and entropy squeezing for superconducting qubits." *Results in Physics* (2022): 105639.
- [YF] Shaw, M. D., Justin F. Schneiderman, J. Bueno, B. S. Palmer, Per Delsing, and P. M. Echternach. "Characterization of an entangled system of two superconducting qubits using a multiplexed capacitance measurement." *Physical Review B* 79, no. 1 (2009): 014516.
- [vv] Ficek, Z., and R. Tanaś. "Dark periods and revivals of entanglement in a two-qubit system." *Physical Review A* 74, no. 2 (2006): 024304

اما با این حال سرکوب نمیشود. این شکل تفاوت انرژی جوزفسون کیوبیت اول و دوم را بدلیل ساختار شکل ۱ نشان مردهد.



شکل۴: رفتار کیفی درهمتنیدگی بر حسب انرژی جوزفسون کیوبیت دوم EJ2 برای انرژی جوزفسون کیوبیت اول EJI های مختلف در دمای یک کلوین.

## نتيجه گيرى

رفتار کیفی درهمتنیدگی برای یک سیستم دو کیوبیت بار جفتشده ناهمسان در حضور نوسانات کوانتومی که با استفاده از تکنیک پالس رخ میدهد، بررسی شد. کیوبیتها در طول نوسانات، درهمتنیده میشوند و این درهمتنیدگی برای انرژیهای جوزفسون مختلف، انرژیهای جفتشدگی مختلف، و دماهای مختلف بررسی شد. در طول این محاسبات مشاهده شد با افزایش انرژی جفتشدگی یا جوزفسون در طول دماهای بالا (حتی دمای انرژی جفتشدگی یا جوزفسون در طول دماهای بالا (حتی دمای انرژی میتای آزمایشگاهی را در دمای اتاق روی این مدل دوکیوبیتی، انجام داد. از مهمترین کاربردهای این کار، میتوان به بهبود عملکرد رادارها و کامپیوترهای کوانتومی اشاره کرد.

## مرجعها

- [1] Nielsen, M. A. & Chuang, I. L. Quantum Computation and Quantum Information. (*Cambridge Univ. Press, Cambridge*, 2000).
- [Y] Yu, Qian, et al, "Feasibility study of quantum computing using trapped electrons," *Physical Review A* 105, no. 2 (2022); 022420.
- [r] Pezzagna, Sébastien, and Jan Meijer. "Quantum computer based on color centers in diamond." *Applied Physics Reviews* 8, no. 1 (2021): 011308.
- [\*] Bravyi, Sergey, Oliver Dial, Jay M. Gambetta, Darío Gil, and Zaira Nazario. "The future of quantum computing with superconducting qubits." *Journal of Applied Physics* 132, no. 16 (2022): 160902.
- [5] Pashkin, Yu A., T. Yamamoto, O. Astafiev, Yasunobu Nakamura, D. V. Averin, and J. S. Tsai. "Quantum oscillations in two coupled charge qubits." *Nature* 421, no. 6925 (2003): 823-826.
- [9] Chirolli, Luca, and Guido Burkard. "Decoherence in solid-state qubits." Advances in Physics 57, no. 3 (2008): 225-285.
- [v] Hime, Travis, P. A. Reichardt, B. L. T. Plourde, T. L. Robertson, C-E. Wu, A. V. Ustinov, and John Clarke. "Solid-state qubits with currentcontrolled coupling." *science* 314, no. **5804** (2006): 1427-1429.





## سنتز و مشخصه یابی نانو کامپوزیت مغناطیسی NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>

جمادی، فرناز؛ سیدیزدی، جمیله؛ ابراهیمی تزنگی، فاطمه؛ پورهاشمی، خبیصی؛ ابوالفضل؛ کارآمد، علیرضا گروه فیزیک دانشگاه ولی عصر (عج) رفسنجان

چکیدہ

در این مقاله نانوکامپوزیت مغناطیسی NiFe2O4/Fe3O4 با روش همرسوبی سنتز و خصوصیات مغناطیسی این ساختار بررسی شد. برای مشخصه یابی نمونهی تهیه شده از آنالیزهای XRD(پراش سنجی پرتوی ایکس)، FTIR(طیف سنجی تبدیل فوریه فروسرخ)،VSM(مغناطیس سنج نمونه ارتعاشی)، SEM رویشی)، EDS(طیف سنجی پراش انرژی پرتوی ایکس) استفاده گردید. نتایج آنالیز XRD نشان میدهد که سنتز ماده موفقیت آمیز بوده و نمونه به صورت یک بلور با ساختار اسپینل معکوس شکل گرفته است. بر طبق آنالیز VSM مغناطش اشباع نانوکامپوزیت NiFe2O4/Fe3O4 برابر MiFe2O4/Fe3O5 که به مقدار زیادی نسبت به فریت نیکل NiFe2O4/Fe3O1 برابر MiFe2O4/Fe3O5 افزایش یافته است.

واژه های کلیدی: نانوکامپوزیت مغناطیسی، فریت نیکل، روش همرسوبی.

#### Synthesis and characterization of NiFe2O4/Fe3O4 magnetic nanocomposites

#### Jamadi, Farnaz; Seyedyazdi, Jamileh; Ebrahimi-Tazangi, Fatemeh; Pourhashemi-Khabisi, Abolfazl; Karamad, Alireza

Department of Physics, Faculty of Science, Vali-e-Asr University of Rafsanjan, Rafsanjan.

#### Abstract

In this study, magnetic nanocomposites of NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> have been synthesized by co-precipitation method. Structural and magnetic properties of the sample have been investigated by different characterizations such as XRD (X-ray diffraction), FTIR (Fourier-transform infrared spectroscopy), VSM (vibrating sample magnetometer), energy dispersive X-ray analysis (EDS), and scanning electron microscope (SEM). XRD results show that the synthesized sample successfully shows an inverse spinel structure. According to VSM results the saturation magnetization of NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> magnetic nanocomposite is 64.47 emu/g which has been increased compared to the saturation magnetization of NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (56.48 emu/g).

Keywords: Magnetic nanocomposite, Nickel ferrite, Co-precipitation method.

PACS No. 75.20

اسنوک<sup>۱</sup> بالا، دمای کوری بالا، و مقاومت ویژه الکتریکی بالا، پایداری شیمیایی و مکانیکی عالی، و میدان ناهمسانگردی بالا می باشند، بدینجهت کاربردهای بسیار وسیعی را در زمینه صنایع برق، الکترونیک، مخابرات، کامپیوتر، حسگر، مواد جاذب مغناطیسی و غیره به خود اختصاص دادهاند.

مقدمه

بهطورکلی فریت به آن دسته از مواد مغناطیسی اطلاق می شود که جز اصلی تشکیل دهنده آن ها اکسید آهن است و دارای ویژگی فریمغناطیس می باشند و دارای پارامترهای مغناطیسی مطلوبی نظیر ضریب نفوذپذیری مغناطیسی بالا، مغناطش اشباع زیاد، محدودیت

<sup>1</sup> Snoke limitation



فریتهای اسپینل نانوساختار در سالهای اخیر به دلیل کاربردهای وسیع آنها در طیف گسترده ای از فروسیال، تصویربرداری تشدید مغناطیسی و فریتهای اسپینل با فرمول کلی MFe<sub>2</sub>O4 (M=Zn,Mg,Ba,Co,Cu,Fe,Mn,Ni) می باشند.

فریت نیکل با ساختار اسپینلی معکوس یکی از فریت های مهم است که به عنوان ماده مغناطیسی نرم مورد استفاده قرار می گیرد. در این ماده اتمهای اکسیژن یک ساختار بلوری به هم پیوسته را تشکیل می دهند. به دلیل مقاومت الکتریکی بالای فریت نیکل، جریانهای گردابی که با میدانهای مغناطیسی متناوب همراه هستند، محدود می شوند و به همین دلیل این آلیاژ در کاربردهای فرکانس بالا، کاربردهای زیست پزشکی، حسگرها، ابرخازنها و توجه قابل توجهی را به خود جلب کرده اند. همچنین به علت خاصیت اشباع مغناطش بالا و وادارندگی مغناطیسی و دمای چگالش پایین در هسته-استفاده قرار می گیرد. فریتهای اسپینلی به خاطر خاصیت مغناطیسی، الکتریکی و کاتالیستی از اهمیت بالایی برخوردار است [1].

عنصر آهن به صورت ترکیب نشده کمیاب میباشد، ولی در صورت ترکیب با عناصر دیگر به فراوانی بر روی زمین یافت می-شود. تاکنون ۱٦ نوع آهن اکسید شناخته شده است.

مگنتیت به دلیل ویژگیهای خاص خود مانند سازگاری زیستی خوب، هزینه کم، آمادهسازی آسان، نسبت سطح به حجم بالا، توانایی واکنش سطح بالا، برچسبگذاری آنالیتها و توانایی جذب قوی تر برای ساکن کردن بیومولکول مورد نظر، یکی از جالب ترین نانوذرات مغناطیسی است، همچنین به راحتی تحت تأثیر میدان خارجی قرار می گیرد که نسبت سیگنال به نویز بالا و استخراج آسان، در نمونههای بیولوژیکی فراهم میکند.

از طرف دیگر به علت شاخصههای جذب عالی مانند نفوذپذیری مغناطیسی بالا، اشباع مغناطیسی بالا، پایداری گرمایی و قطبش اسپینی قوی در دمای اتاق، میتواند به عنوان ماده جاذب مغناطیسی استفاده شود. قسمت حقیقی گذردهی بالا برای Fe<sub>3</sub>O4 به معنای اهرمهای بالای قطبش الکتریکی و هدایت الکتریکی به دلیل انتقال سریع الکترون بین <sup>۳</sup>+Fe و <sup>۲</sup>+Fe است [۵–۱].

## روش کار

در این آزمایش نانوکامپوزیت مغناطیسی NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> با استفاده از روش همرسوبی سنتز شد. برای این کار Ni(NO)<sub>3</sub>.6H<sub>2</sub>O و Ni(NO)<sub>2</sub>.9H<sub>2</sub>O به نسبت معینی (هر کدام به صورت جداگانه) در ۳۷/۵ میلی لیتر آب دیونیزه حل شد. به منظور همگن شدن، هر کدام از این دو محلول در دستگاه آلتراسونیک قرار داده شدند. سپس محلولهای حاوی نیترات نیکل و نیترات آهن را مخلوط کرده و برای همگن شدن به مدت ربع ساعت روی دستگاه همزن مغناطیسی قرار گرفت. با اضافه کردن NH4.OH به صورت قطرهای H4 محلول به ۱۱ رسانده شد. سپس محلول حاصل به مدت داده شد و نیترات نیکل و نیترات آهن را مدین مغناطیسی ۱۹ محلول به ۱۰ درجه سلسیوس قرار داده شد و فریت مغناطیسی NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> تشکیل شد.

در مرحله بعدی به ۰٬۰۳ گرم از این ماده ۵۰ میلی لیتر آب اضافه شد و به مدت ۱ ساعت با استفاده از دستگاه آلتراسونیک همگن شد. در این مرحله بالن حاوی محلول فریت NiFe2O4 تحت گاز نیتروژن قرار گرفت و ۲٫۰ گرم FeCl2 و ۰٫۰ گرم FeCl3 و ۹ میلی لیتر آمونیاک به صورت قطرهای به آن اضافه شد و به مدت نیم ساعت تحت شرایط ذکر شده با همزن مغناطیسی همزده شد و سرانجام نانوکامپوزیت مغناطیسی JiFe2O4/Fe3O4 تشکیل شد. به دلیل دارا بودن خاصیت مغناطیسی نانوکامپوزیت حاصل با استفاده از آهنربا جداسازی شده و با آب و اتانول شستشو داده شد و نهایتاً به مدت ۲ ساعت با دمای ٤٠ درجه سلسیوس خشک شد.

## نتايج و بحث

نتایج XRD نانوکامپوزیت NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> در شکل ۱ نشان داده شده است. قلههای موجود در زوایای ۲۰۰٬۳۰٬ ۵۰۶٬۳۰٬ ۲۰٬۳۵٬ ۵۰۲٬۹۵٬ ۵۰۷٬۳۰٬ ۲۰٬۹۰ به ترتیب نشان دهنده صفحات بلوری (۲۲۰)، (۱۱۳)، (۰۰٤)، (۲۲٤)، (۱۱۵)، (۰۰۶) مربوط به فریت نیکل NiFe<sub>2</sub>O4 هستند. همچنین قلههای مربوط به زوایای مربوط به زوایای ۲۲/۸۹٬ ۳۰٬۲۰۰٬ ۵۰٬۲۳۵٬ ۵۰٬۲۳۵٬ ۲۲/۸۹۰ متعلق به اکسید آهن Fe<sub>3</sub>O4 و نشان دهنده صفحات بلوری (۱۱۱)، (۰۲۲)، (۱۱۲)، (۲۲۲)، (۰۰٤)، (۲۲۲)، (۳۳۳)، (۱۵۰۰) میباشند که

در بسیاری از زوایا بر قلههای NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> منطبق هستند. ساختار نمونه اسپینلی معکبی است و NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> با کامپوزیت شدن با Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> تغییر نکرده است و طبیعت نانوبلوری شدن مواد را مشخص میکند [۲] الگوی پراش پرتو ایکس نشان میدهد که اکسید آهن و فریت نیکل در ساختار وجود دارند.



شكل ۱- أناليز XRD نانو كامپوزيت NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>



شکل ۲ آنالیز FTIR نانوکامپوزیت NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/Fe<sub>3</sub>O4 و فریت نیکل را نشان میدهد، که بیانگر وجود پیوندهای Fe-O و Ni-O در ۵٦۲ cm<sup>-1</sup> میباشد. وجود قله در ۳۴٤۹ cm<sup>-1</sup> بیانگر پیوند ارتعاشی کششی H-O متعلق به آب جذب شده درسطح نمونه است.

مطابق شکل ۳ مغناطش اشباع نانوکامپوزیت NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> و NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> به ترتیب برابر ۹۲٫۲۷ emu/g و ۹۲٫٤۸ emu/g است. بنابراین با افزودن اکسید آهن به فریت نیکل مغناطش نمونه به طرز چشمگیری افزایش مییابد.



شكل ٤- ميدان وادارندگى نانوكامپوزيت NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>.

میدان وادارندگی میدانی است که پس از رسیدن ماده به اشباع مغناطیسی باید اعمال شود تا مغناطش به صفر کاهش یابد [۳].

شکل ٤ مقدار میدان وادارندگی را نشان میدهد. آنالیز EDS نمونه (شکل ٥) بیانگر وجود عناصر نیکل و آهن و اکسیژن در



## نتيجهگيري

در این پژوهش نانوکامپوزیت مغناطیسی NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> با استفاده از روش همرسوبی سنتز شد. آنالیز FTIR وجود پیوندهای تشکیل شده فلز با اکسیژن O-Fe و O-N را در عدد موج <sup>1-</sup>OT cm تأیید می کند. آنالیز EDS حضور عناصر نیکل و آهن و اکسیژن در نانوکامپوزیت مغناطیسی NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> نشان می دهد، بنابراین سنتز با موفقیت انجام شده است. تصویر SEM بیانگر خاصیت مغناطیسی بالای نانوکامپوزیت است، زیرا نانوذرات در این تصویر در بعضی مکانها تجمع یافته و یکدیگر را به دلیل خاصیت بالای مغناطیسی جذب نمودهاند. آنالیز VSM بیانگر این NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> و نسبت به مغناطش اشباع NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> برابر NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> و نسبت به مغناطش اشباع NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> و این NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> افزایش یافته است و NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> افزایش افزایش یافته است و

مرجعها

- [1] S. Jena, D. K. Mishra, A. Soam, N. Jakhar, P. Mallick, "Control growth of NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> phase in thermal annealed α-Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> nanocomposites for the beneficial magnetic application", *Applied Physics A*, (2021) 127:519.
- [2] S. Karmakar, K. L. Routray, B. Panda, B. Sahoo, D. Behera, "Construction of core@shell nanostructured NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>@TiO<sub>2</sub> ferrite NAND logic gate using fluorescence quenching mechanism for TiO<sub>2</sub> sensing", *Journal of Alloys and Compounds* **765** (2018) 527-537.
- [3] M. Getzlaff; "Fundamentals of magnetism"; Springer Berlin Heidelberg New York (2008) 119.
- [4] Zhao Xue, Linlin Li, Linjuan Cao, Wenzhi Zheng, Wei Yang, Xinwei Yu, A simple method to fabricate NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/NiO@Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> core-shelled nanocubes based on Prussian blue analogues for lithium ion battery, *Journal of Alloys and Compounds* 825 (2020) 153966.
- [5] Magnetic NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> nanoparticles: efficient heterogeneous and reusable catalyst for synthesis of acetylferrocene chalcones and their anti-tumour activity *Appl. Organometal.* Chem. **70** (2016).

نانوکامپوزیت مغناطیسی NiFe<sub>2</sub>O4/Fe<sub>3</sub>O4 است. بنابراین سنتز ماده مورد نظر بدون ورود ناخالصی و با موفقیت انجام گرفته است.



شكل ٥- آناليز EDS نانوكامپوزيت NiFe2O4/Fe3O4.

تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی از نانوکامپوزیت NiFe<sub>2</sub>O4/Fe<sub>3</sub>O4 در شکل ۲ نشان داده شده است. به دلیل خاصیت مغناطیسی زیاد نمونه ذرات عمدتاً یکدیگر را جذب کرده و در بعضی جاها تجمع یافتهاند.



شكل NiFe2O4/Fe3O4 نانوكامپوزيت SEM نانوكامپوزيت





# اثرات هم بستگی بین سایتی برساختار نواری و چگالی حالات شبکه مربعی دوبعدی اندرکنشی ربیع بیگی ، پوریا<sup>1ر2</sup> ؛ مرادیان، رستم<sup>1ر2</sup> <sup>1</sup>دانشگاه رازی کرمانشاه ،دانشکده علوم ، گروه فیزیک <sup>2</sup>دانشگاه رازی کرمانشاه ، مرکز تحقیقات علوم و فناوری نانو

#### چکیدہ

با استفاده از تئوری میدان متوسط دینامیکی تک سایتی<sup>(</sup> (DMFT) و فراتر از تقریب چند سایتی سوپر سل محیط موثر<sup>۲</sup> (BEMSCA) در چارچوب مدل هابارد، ما ساختار نواری و چگالی حالتهای یک سیستم مربع دو بعدی را در حضور اندرکنش کولنی محلی محاسبه می کنیم. نتایج ما نشان می دهد که چگالی حالات در اندرکنش های ضعیف برای هردو تقریب ، یکسان هستند ، اما با افزایش شدت اندرکنش کولنی ، نتایج این دو تقریب با هم متفاوت است ، که نشان می دهد همبستگی های الکترونی چند سایتی در شدت اندرکنش های قوی ، نقش مهمی ایفا می کند.این هم بستگی های چند سایتی در تقریب TMFT نادید گرفته شده اند. همچنین در این کار ، ساختار نواری نورمال محاسبه می شود که از طریق آن می توان گذار فاز را به راحتی تشخیص داد.گذار فاز برای تقریب چند سایتی نسبت به تقریب تک سایتی در شدت اندرکنش کولنی پایین تری اتفاق می افتد ، که نشان دهنده اهمیت در نظر گرفتن سهم هم بستگی های بین سایتی در تقریب هایتی در تعریب تک سایتی در شدت اندرکنش کولنی پایین تری اتفاق می افتد ، که نشان دهنده اهمیت در نظر گرفتن

واژه های کلیدی: هم بستگی بین سایتی ، اندرکنش کولنی ، تقریب میدان متوسط دینامیکی ، تقریب فراتر از سوپرسل محیط موثر ، چگالی حالات ، ساختار نواری

# Effects of inter-site correlation on band structure and density of states of interacting two-dimensional square lattice

Poorya Rabibeigi<sup>1,2</sup>, Rostam Moradian<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Physics Department, Faculty of Science Razi University, Kermanshah, Iran.

<sup>2</sup>Nano Science and Nano Technology Research Center, Razi University, Kermanshah, Iran.

#### Abstract

By using single-site dynamical mean field theory (DMFT) and multi-sites beyond effective medium supercell approximation (BEMSCA) in the framework of the Hubbard model we calculated band structure and density of states of a square 2d system with local Coulomb interacting electrons. Our results show that the density of states in weak interactions are the same for both approximations, but as the strength of the Coulomb interaction increases, the results of these two approximations are different, which indicates that intersite electron correlations in strong interactions plays an important role. These

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Dynamical Mean Field Theory

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Beyond Effective Medium Supercell Approximation



intersite correlations are neglected in the DMFT approximation. Also in this work, the normal band structure is calculated, through which the phase transition can be easily recognized. The phase transition for the multi-site approximation occurs at a lower Coulomb interaction than the single-site approximation, which indicates the importance in Considering the inter-site correlations in the BEMSCA approximation.

*Keywords:* Intersite correlation, Coulomb interaction, dynamic mean field theory, beyond effective medium supercell approximation, density of states, band structure

PACS No. 70

روش کوانتوم مونت کارلو با استفاده از الگویتم هیریش – فای<sup>3</sup> ، روش مناسبی برای مطالعه این مدل هامیلتونی می باشد[8–11] . ما در این کار ، با استفاده از روش کوانتوم مونت کارلو برای حل تابع گرین ناخالصی با پارامتر مونت کارلو برای حل تابع گرین ناخالصی با پارامتر مونت کارلو برای حل تابع گرین ناخالصی و یا پارامتر مونت کارلو برای و یابع مونت کارلو برای دو بعدی مربعی را در حضور اندرکنش کولنی محلی مورد بررسی قرار می دهیم.

محاسبه ساختار نوارى اندركنشى

سلف انرژی در تقریب DMFT در فضای حقیقی ، کاملا محلی است ، به عبارت دیگر مستقل از بردار موج است [14].سلف انرژی در تقریب EMSCA یک تابع پله ایی است و در منطقه اول بریلوئن نا پیوسته است. با استفاده از تقریب BEMSCA می توان سلف انرژی پیوسته در منطقه اول بریلوئن را محاسبه کرد[15]. با داشتن سلف انرژی در FBZ می توان به صورت زیر ساختارنواری نورمال شده را محاسبه کرد.تابع گرین اندرکنشی به صورت زیر است.

 $\bar{G}(n\vec{k};E+i\eta) = [G^{0}(n\vec{k},E+i\eta))^{-1} - \Sigma(\vec{k},E+i\eta)]^{-1}$  (2)

بررسی اثر اندرکنش کولنی بر ساختار الکترونیکی شبکه های مختلف ، از موضوعات مورد علاقه فیزیک ماده چگال است. شبکه ی دو بعدی مربعی در حضور اندرکنش کولنی محلی از اهمیت بالایی برخوردار است ، چرا که می تواند کاندیدای مناسبی برای ابررسانایی دمای بالا باشد[1]. هامیلتونی هابارد[2] ، دینامیک الکترونهای اندرکنشی در شبکه را توصیف می کند. برای حالت خاص اندرکنش کولنی محلی ، هامیلتونی هابارد به صورت زیر است.

$$\hat{H} = \sum_{\substack{ij\\\sigma}} t_{ij} \Big[ \hat{c}^{\dagger}_{i\sigma} \hat{c}_{j\sigma} + H.C. \Big] + u \sum_{i} \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - \mu \sum_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma}$$
<sup>(1)</sup>

که در آن u اندرکنش کولنی محلی روی سایت های شبکه است. $\mu$  پتانسیل شیمیایی است که در حالت باند نیمه پر  $\mu=u/2$  است. مدل هابارد برای توصیف گذار عایق \_ فلز و گذارهای فاز مغناطیسی در فلزات واسطه به کاربرده می شود[3].علی رغم ظاهر ساده مدل هابارد ، فقط در یک بعد حل دقیق دارد[4]. در ابعاد بالاتر ، به صورت دقیق حل نشده است و روش های تقریبی متنوعی برای مطالعه این مدل هامیلتونی استفاده شده اند، که مهمترین آن ها عبارتند از تئوری خوشه اختلالی<sup>'</sup> (CPT)[5, 6] ، TMFT [7]

مقدمه

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Dynamical Cluster Approximation

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Effective Medium Supercell Approximation.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Hirsch - Fye

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Cluster perturbation theory





شکل 1 : مقایسه چگالی حالات در دو تقریب تک سایتی و چند سایتی

در شکل 2 ساختار نواری شبکه مربعی دو بعدی اندرکنشی در شدت اندرکنش های بحرانی رسم شده است. شدت اندرکنش بحرانی ، به شدتی گفته می شود که در آن گذار فاز اتفاق می افتد. شدت اندرکنش بحرانی برای تقریب چند سایتی ,uc=9.05t وبرای تک سایتی vollege است. اندرکنش بحرانی برای تقریب چند سایتی به مراتب از شدت اندرکنش بحرانی در تقریب چند سایتی به مراتب از شدت مایدر کنش بحرانی در تقریب چند سایتی در اندرکنش مای ضعیفتری اتفاق می افتد. این موضوع نشان دهنده اهمیت در نظر گرفتن هم بستگی های بین سایتی در تقریب چند سایتی است ، که در تقریب تک سایتی از آن ها چشم پوشی شده است.



$$N(n\vec{k}, E) = \frac{-1}{\pi} \operatorname{Im} \overline{G}(n\vec{k}, E + i\eta)$$
(3)

با استفاده از این چگالی حالات ، به ازای هر بردار موج ، انرژی ایی که این تابع طیفی را بیشینه کند ، ساختار نواری در آن بردار موج مورد نظر می باشد [13].

$$E_{n,\vec{k}} = N(\vec{k};E)|_{mth_max\,imum}$$
(4)

با استفاده از این ساختار نواری نورمال ،می توان به راحتی چگالی حالات اندرکنشی شبکه را محاسبه کرد.

## نتايج

در شکل (1) چگالی حالات در دو تقریب تک سایتی DMFT و تقریب چند سایتی BEMSCA در اندرکنش های های کولنی ضعیف و قوی رسم شده اند.در اندرکنش های ضعیف ، نتایج هردو تقریب مشابه می باشد ، که نشان می دهد هم بستگی های بین سایتی در اندرکنش های ضعیف ، من اهمیت هستند. اما در اندرکنش های قوی تر ، نتایج حاصل از دو تقریب ، کاملا باهم تفاوت دارند ، که نشان دهنده اهمیت در نظر گرفتن هم بستگی های بین سایتی در اندرکنش های قوی است. در تقریب تک سایتی، از این هم بستگی های بین سایتی ،چشم پوشی شده است.







- مرجع ها
- .1 Adamczyk, M., et al., Influence of On-Site Coulomb Interaction on Parameters of Superconducting State in Two-Dimensional Lattices. Acta Physica Polonica, A., 2021. 139(5.(
- 2 Hirsch, J.E., *Two-dimensional Hubbard model: Numerical simulation study.* Physical Review B, 1985. 31(7): p. 4403.
- 3 Brandow, B., *Electronic structure of Mott insulators*. Advances in Physics, 1977. 26(5): p. 651-808.
- .4 Lieb, E.H. and F. Wu, Absence of Mott Transition in an Exact Solution of the Short-Range, One-Band Model in One Dimension, in Condensed Matter Physics and Exactly Soluble Models. 2004, Springer. p. 639-642.
- 5 Huang, E.W., et al., *Determinantal quantum Monte Carlo solver for cluster perturbation theory*. Physical Review Research, 2022. 4(4): p. L042015.
- .6 Sénéchal ,D., Cluster perturbation theory, in Strongly Correlated Systems. 2012, Springer. p. 237-270.
- .7 Kyung, B., et al., Pseudogap induced by short-range spin correlations in a doped Mott insulator. Physical Review B, 2006. 73(16): p. 165114.
- .8 Hirsch, J., et al., Efficient Monte Carlo procedure for systems with fermions. Physical Review Letters, 1981. 47(22): p. 1628.
- 9 Hirsch, J., Stable Monte Carlo algorithm for fermion lattice systems at low temperatures. Physical Review B, 1988. 38(16): p. 12023.
- .10 Scalapino, D. and R. Sugar, *Method for performing Monte Carlo calculations for systems with fermions*. Physical Review Letters, 1981. 46(8): p. 519.
- .11 Hirsch, J.E., et al., *Monte Carlo simulations of onedimensional fermion systems*. Physical Review B, 1982. :(9)26p. 5033.
- .12 Vollhardt, D., *Dynamical mean-field theory for correlated electrons*. Annalen der Physik, 2012. 524(1): p. 1-19.
- .13 Moradian, R. and P. Rabibeigi, *How electrons Coulomb repulsion changes graphene band structure*. Scientific Reports, 2 :(1)12 .022p. 1-12.
- .14 Müller-Hartmann, E., *Correlated fermions on a lattice in high dimensions*. Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, 1989. 74(4): p. 507-512.
- .15 Moradian, R. and S. Moradian, *Low dimensions electron localization in the beyond real space super cell approximation*. Scientific reports, 2019. 9(1): p. 1-9.



شکل 2: ساختار نواری شبکه مربعی دو بعدی اندرکنشی در شدت اندرکنش بحرانی

### نتيجه گيرى

در این پروژه ، اثر اندرکنش کلنی محلی در تقریب های تک سایتی DMFT و چند سایتی BEMSCA با استفاده از روش کوانتوم مونت کارلو مورد بررسی قرار گرفته است و اثرات هم بستگی های بین سایتی برچگالی حالات و ساختارنواری شبکه مربعی دو بعدی بررسی شده است. نتایج ما نشان می دهد که در اندرکنش های ضعیف ، چگالی حالات دو تقریب ، مشابه هستند اما در انرکنش های قوی ، نتایج باهم متفاوت هستند، که نشان می دهد در اندرکنش های قوی ، هم بستگی های بین سایتی نقش مهمی را ایفا اندرکنش های پایینتری اتفاق می افتد ، که نشان دهنده اهمیت در نظر گرفتن هم بستگی های بین سایتی در تقریب چند سایتی است که در تقریب تک سایتی از آنها چشم پوشی شده است.





## رقابت اندرکنش کولنی و پتانسیل ناخالصی در تغییر فاز شبکه مربعی

**ربیع بیگی ، پوریا<sup>1و2</sup> ؛ مرادیان، رستم<sup>2,2</sup>** <sup>1</sup> دانشگاه رازی کرمانشاه ،دانشکده علوم ، گروه فیزیک <sup>2</sup> دانشگاه رازی کرمانشاه ، مرکز تحقیقات علوم و فناوری نانو

#### چکیدہ

در این پروژه رقابت بین اندرکنش کولنی محلی و پتانسیل ناخالصی در تغییر فاز شبکه مربعی ، با استفاده از روش کوانتوم مونت کارلو در تقریب های تک سایتی DMFT+CPA و تقریب چند سایتی BEMSCA مورد بررسی قرار می گیرد. رقابت اندرکنش کولنی و پتانسیل ناخالصی ، منجر به ایجاد فازهای مختلفی در ماده می شود ، که شدت اندرکنش های کولنی بحرانی که در آن ها گذار فاز اتفاق می افتد ، برای تقریب های تک سایتی و چند سایتی متفاوت هستند. این موضوع نشان دهنده اهمیت در نظر گرفتن پراکندگی های چند سایتی در تقریب چند سایتی است ، که در تقریب تک سایتی از آنها چشم پوشی می شود.

**واژه های کلیدی**: اندرکنش کولنی ،پتانسیل ناخالصی، گذار فاز، تقریب میدان متوسط دینامیکی ،تقریب پتانسیل همدوس ، تقریب فراتر از سوپرسل محبط موثر

## Competition between Coulomb interaction and impurity potential in twodimensional square lattice phase transition

Poorya Rabibeigi<sup>1,2</sup>, Rostam Moradian<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Physics Department, Faculty of Science Razi University, Kermanshah, Iran.

<sup>2</sup>Nano Science and Nano Technology Research Center, Razi University, Kermanshah, Iran.

#### Abstract

In this project, the competition between the local Coulomb interaction and the impurity potential in the phase change of the square lattice is investigated using the quantum Monte Carlo method in the DMFT+CPA single-site approximation and the BEMSCA multi-site approximation. The competition between the Coulomb interaction and the impurity potential leads to the creation of different phases in the material, where the intensity of the critical Coulomb interactions in which the phase transition occurs are different for single-site and multi-site approximations. This result shows the importance of considering multi-site scattering in the multi-site approximation, which is neglected in the single-site approximation.

*Keywords:* Coulomb interaction, impurity potential, phase transition, dynamic mean field theory, Coherent Potential Approximation, beyond effective medium supercell approximation

PACS No. 70



#### مقدمه

سیستم های بس ذره ایی کوانتومی که در آن ها اندرکنش کولنی و پتانسیل ناخالصی به صورت همزمان حضور دارند ، در فيزيك حالت جامد از اهميت بالايي برخوردار هستند ، چرا كه رقابت اندركنش كولني با پتانسيل ناخالصي ، منجر به ایجاد فازهای مختلفی در ماده می شود [1-5]. گذار فلز-عایق در حضور اندرکنش کولنی و پتانسیل بی نظمی به تنهایی ، در سیستم دوبعدی در حالت باند نیمه پر به خوبی مشخص شده است ، که اندرکنش کولنی محلی ، گاف Mott را ایجاد می کند و باعث ایجاد فازعایق Mott می شود ، و پتانسیل بی نظمی<sup>ا</sup> قوی نیز شکاف Anderson را القا مي كند[6–9]، اما هنگامي كه اندركنش كولني و يتانسيل ناخالصی با یکدیگر و با پتانسیل شبکه رقابت میکنند ، مساله پیچیده می شود. اهمیت سیستم های اندرکنشی- بی نظمی در این است که سیستم های واقعی بسیاری وجود دارند که در آن ها اندرکنش کولنی و پتانسیل بی نظمی با یکدیگر رقابت می کنند به عنوان مثال ترانزیستورهای میدان-موثر نیم رسانا[10, 11] ، آرایه های نانو در سطوح دو بعدى[12-15] و... . هاميلتونى براى سيستم اندركنشى – آلیاژی به صورت زیر است.

$$\hat{H} = \sum_{\substack{ij\\\sigma}} t_{ij} \Big[ \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} + \text{H.C.} \Big] + u \sum_{i} \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \sum_{i\sigma} (\epsilon_i - \mu) \hat{n}_{i\sigma}$$
(1)

که در آن u اندرکنش کولنی محلی روی جایگاههای شبکه است. $\mu$  پتانسیل شیمیایی است که در حالت باند نیمه پر  $\mu=u/2$  است. $\epsilon_i$  انرژی برجایگاهی تصادفی آلیاژی است که برای جایگاههای میزبان مقدار  $2/\delta-$  را با احتمال  $\delta/2$  را به خود می گیرد و برای جایگاه های مهمان مقدار  $2/\delta$  را با احتمال 2 به خود می گیرد.

روش کوانتوم مونت کارلو با استفاده از الگویتم هیریش -فای<sup>۲</sup> ، روش مناسبی برای مطالعه این مدل هامیلتونی می باشد[16–19] . ما در این کار ، با استفاده از روش کوانتوم مونت کارلو برای حل تابع گرین ناخالصی در تقریب تک سایتی تئوری میدان متوسط دینامیکی<sup>۳</sup> DMFT [20] برای سیستم اندرکنشی و تقریب پتانسیل همدوس<sup>3</sup> (CPA) برای سیستم آلیاژی ، و تقریب چند سایتی فراتر از تقریب سوپرسل محیط موثر<sup>6</sup>(BEMSCA) [21]، تابع گرین متوسط در زمان موهومی را مورد بررسی قرار می دهیم، که می توان از طریق این تابع گرین زمان موهومی ، گذار فازها را مشاهده کرد.

## تابع گرين متوسط

خروجی روش های مذکور ، خود⊣نرژی<sup>۲</sup> فرکانس موهومی ، کروجی روش های مذکور ، خود⊣نرژی<sup>۲</sup> فرکانس موهومی ، یابع گرین متوسط فرکانس موهومی را محاسبه کرد.

$$\bar{G}(n\vec{k};i\omega_{n}) = [(G^{0}(n\vec{k},i\omega_{n}))^{-1} - \Sigma(\vec{k},i\omega_{n})]^{-1}$$
(2)

با استفاده از رابطه زیر می توان تبدیل فوریه زمان موهومی تابع گرین متوسط را محاسبه کرد.

$$\overline{G}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} e^{-i\omega_n \tau} \overline{G}(i\omega_n)$$
(3)

گذار فاز را می توان از طریق کمیت های مختلفی استخراخ کرد .مهمترین این کمیت ها عبارتند از منحنی  $\beta \overline{G}(\tau = \beta / 2)$  بر حسب شدت اندرکنش کولنی [6] ، منحنی وزن شبه ذره بر حسب شدت اندرکنش کولنی [22] و شکافتگی نوارها در سطح فرمی [6]. هنگامی که منحنی

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Disorder potential

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Hirsch - Fye

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Dynamic Mean Field Theory

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Coherent Potential Approximation

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup> Beyond Effective Medium Supercell Approximation

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup> Self energy

 $\beta \overline{G}(\tau = \beta/2)$  برحسب شدت اندرکنش کولنی به سمت صفر می رود ، گذار فاز اتفاق می افتد. در این پروژه با استفاده از منحنی  $\beta \overline{G}(\tau = \beta/2)$  بر حسب شدت اندرکنش کولنی برای پتانسیل بی نظمی ثابت  $\delta = 8.0t$  ، به صورت کیفی گذار فاز ها و مرز گذار فاز ها را مشخص می کنیم.

نتايج

در شکل (1) تابع گرین متوسط در زمان موهومی ( $\beta \overline{G}(\tau = \beta / 2)$ )بر حسب اندرکنش های کولنی مختلف در پتانسیل بی نظمی ثابت  $\delta = 8.0t$  در دو تقریب تک سایتی و چند سایتی رسم شده است.



شكل (1) : تابع گرين زمان موهومى  $(\beta \, | \, \pi = \beta \, / \, 2)$  بر حسب شدت اندركنش كولنى مختلف در پتانسيل بى نظمى ثابت  $\delta = 8.0 t$ 

از تحلیل شکل (1) می توان اطلاعات مفیدی در مورد فازهای مختلف شبکه و گذار فاز در شبکه را استخراج کرد. مطابق شکل (1) ، در  $\delta = 8.0t$  و در غیاب اندرکنش کولنی (u=0) ،مقدار تابع  $\beta \overline{G}(\tau = \beta / 2)$  برای هردو تقریب تک سایتی و چند سایتی به سمت صفر میل می کند ، در نتیجه در این نقطه، هردو تقریب فاز عایق اندرسون را پیش بینی میکنند . این پیش بینی نیز با تجربه در توافق

است، چرا که پتانسیل بی نظمی قوی ، فاز عایق اندرسون را به شبکه القا می کند. با ورود اندرکنش کولنی، در هردو تقریب تک سایتی و چند سایتی مقدار تابع از صفر شروع به افزایش می کند. به  $\beta \overline{G}(\tau = \beta / 2)$ عبارت دیگر ، بین نوارهای ظرفیت و رسانش مادامی که مقدار تابع  $\beta \overline{G}(\tau = \beta / 2)$  صفر است ، گاف انرژی وجود دارد و شبکه در فاز عایق اندرسون حضور دارد. با ورود اندرکنش کولنی ، گاف بین نوارهای ظرفیت و رسانش کم می شود. شدت اندرکنش کولنی که در آن ، مقدار تابع ، به یک مقدار غیر صفر قابل توجه برسد  $\beta \overline{G}(\tau\!=\!\beta/2)$ شدت اندرکنش بحرانی است که گذار عایق-فلز اتفاق می افتد. مقدار این شدت اندرکنش بحرانی اول ، برای هردو تقريب ، تقريبا مشابه است. با افزايش بيشتر شدت اندركنش کولنی ، سیستم وارد فاز فلزی می شود. حالت فلزی سیستم ، جایی اتفاق می افتد که شدت اندرکنش کولنی برای غلبه بر پتانسیل بی نظمی، به اندازه کافی بزرگ باشد ، به عبارت ، دیگر مادامی که مقدار تابع  $\beta \overline{G}(\tau = \beta / 2)$  غیر صفر است سیستم در حالت فلزی باقی می ماند. با افزایش بیشتر شدت اندركنش كولني ، مجددا در هردو تقريب ، مقدار تابع به سمت صفر میل می کند ، که نشان دهنده  $\beta \overline{G}(\tau = \beta / 2)$ گذار فلز – عایق است. در این محدوده ، سیستم در حالت عایق قرار دارد ، اما ماهیت این عایق ، با عایق در غیاب اندرکنش کولنی متفاوت است ، چرا که در این ناحیه ، اندرکنش کولنی و پتانسیل بی نظمی به صورت همزمان نقش بازی می کنند و در این محدوده سیستم در عایق مات- اندرسون قرار دارد. در نتیجه حالت فلزى ، بين دو عايق اندرسون و عايق مات-اندرسون ساندویچ شده است. شدت اندرکنشی که در آن گذار فاز فلز– عایق اتفاق می افتد برای دو تقریب تک سایتی و چند سایتی باهم متفاوت هستند و شدت اندرکنش بحرانی برای تقریب چند سایتی به صورت قابل ملاحظه ایی از شدت اندرکنش بحرانی تقریب تک سایتی کوچکتر است ، که نشان دهنده اهمیت در نظر گرفتن پراکندگی چندسایتی در تقریب چند سایتی است.





- .5 Abrahams, E., S.V. Kravchenko, and M.P. Sarachik, Metallic behavior and related phenomena in two dimensions. Reviews of modern physics, 2001. **73**(2): p. 251.
- .6 Lee, H., H.O. Jeschke, and R. Valentí, Competition between disorder and Coulomb interaction in a twodimensional plaquette Hubbard model. Physical Review B, 2016. 93(22): p. 224203.
- .7 Anderson, P.W., *Absence of diffusion in certain random lattices*. Physical review, 1958. **109**(5): p. 1492.
- .8 Altshuler, B.L., A.G. Aronov, and P. Lee, *Interaction effects in disordered Fermi systems in two dimensions*. Physical Review Letters, 1980. **44**(19): p. 1288.
- .9 Kramer, B. and A. MacKinnon, *Localization: theory and experiment*. Reports on Progress in Physics, 1993. **56**(12): p. 1469.
- .10 Kravchenko, S., et al., *Electric field scaling at a B=0 metal-insulator transition in two dimensions*. Physical review letters, 1996. **77**(24): p. 4938.
- .11 Lin, P.V. and D. Popović, Critical behavior of a strongly disordered 2D electron system: the cases of long-range and screened Coulomb interactions. Physical Review Letters, 2015. **114**(16): p. 166401.
- .12 Kim, K., et al., Metal-insulator transition in a disordered and correlated Sr Ti 1-x Ru x O 3 system: Changes in transport properties, optical spectra, and electronic structure. Physical Review B, 2005. **71**(12): p. 125104.
- .13 Maiti, K., R.S. Singh, and V. Medicherla, *Evolution of a band insulating phase from a correlated metallic phase*. Physical Review B, 2007. **76**(16): p. 165128.
- .14 Lahoud, E., et al., *Emergence of a novel pseudogap metallic state in a disordered 2D Mott insulator*. Physical Review Letters, 2014. **112**(20): p. 206402.
- .15 Chikara, S., et al., Sr 2 Ir 1-x Rh x O 4 (x< 0.5): An inhomogeneous j eff= 1 2 Hubbard system. Physical Review B, 2015. **92**(8): p. 081114.
- .16 Hirsch ,J., et al., *Efficient Monte Carlo procedure for* systems with fermions. Physical Review Letters, 1981. **47**(22): p. 1628.
- .17 Hirsch, J., Stable Monte Carlo algorithm for fermion lattice systems at low temperatures. Physical Review B, 1988. **38**(16): p. 1202.3
- .18 Scalapino, D. and R. Sugar, *Method for performing Monte Carlo calculations for systems with fermions*. Physical Review Letters, 1981. **46**(8): p. 519.
- .19 Hirsch, J.E., et al., Monte Carlo simulations of onedimensional fermion systems. Physical Review B, 1982. 26(9): p. 5033.
- .20 Vollhardt, D., *Dynamical mean-field theory for correlated electrons*. Annalen der Physik, 2012. **524**(1): p. 1-19.
- .21 Moradian, R. and P. Rabibeigi, *How electrons Coulomb* repulsion changes graphene band structure. Scientific Reports, 2022. **12**(1): p. 1-12.
- .22 Blümer, N., *Hirsch-Fye quantum Monte Carlo method* for dynamical mean-field theory. The LDA+ DMFT approach to strongly correlated materials, 2011. 1: p. 9.1-9.35.

نتيجه گيرى

در این پروژه ، با استفاده از شبیه سازی کوانتوم مونت کارلو در تقریب تک سایتی DMFT+CPA و تقریب چند سایتی BEMSCA رقابت اندرکنش کولنی و یتانسیل بی نظمی در تغییر فاز شبکه مربعی مورد بررسی قرار گرفته است.در غياب اندركنش كولني و در حضور پتانسيل بي نظمي به اندازه کافی بزرگ ، سیستم در فاز عایق اندرسون قرار دارد. با ورود اندرکنش کولنی ، مقدار تابع  $(\sigma = \beta / 2)$  از صفر افزایش می یابد . با افزایش اندرکنش کولنی ، گذار عايق-فلز اتفاق مي افتد. حالت فلزي ، هنگامي ايجاد مي شود که اندرکنش کولنی برای غلبه بر پتانسیل بی نظمی ، به اندازه كافي بزرگ باشد. با افزايش بيشتر اندركنش كولني ، مجددا مقدار تابع  $\overline{\mathrm{G}}( au\!=\!eta/2)$  به سمت صفر میل می کند ، که بیانگر گذار فاز فلز –عایق است و سیستم در حالت عايق مات-اندرسون قرار مي گيرد. به عبارت ديگر حالت فلزي ، بين دو عايق اندرسون و عايق مات-اندرسون ساندویچ شده است. در نتیجه ، رقابت اندرکنش کولنی و پتانسیل بی نظمی منجر به ایجاد فازهای مختلف در شبکه مربعي مي شود.

مرجع ها

- .1 Mott, N.F., *The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals.* Proceedings of the Physical Society. Section A, 1949. **62**(7): p. 416.
- .2 Lee, P.A. and T. Ramakrishnan, *Disordered electronic* systems. Reviews of modern physics, 1985. **57**(2): p. 287.
- .3 Efros, A.L. and M. Pollak, *Electron-electron interactions in disordered systems*. 2012: Elsevier.
- .4 Belitz, D. and T. Kirkpatrick, *The anderson-mott transition*. Reviews of modern physics, 1994. **66**(2): p. 261.





# استفاده از طیفسنجی مادون قرمز برای تعیین شدت پیوندهای هیدروژنی نانو کامپوزیت پلی

يورتان نرم (الاستومر)-سيليكا

**ندافان، مرضیه؛ مجیدی، رویا** گروه فیزیک، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، تهران

## چکیدہ

در این پژوهش، نانوکامپوزیت پلییورتان به همراه درصدهای وزنی متفاوتی از نانوذرات سیلیکا تهیه و مورد بررسی قرار گرفتند. اثر این نانوذرات بر پلییورتان با استفاده از تصاویر SEM و طیف سنجی FTIR مورد تحلیل قرار گرفت. از تصاویر SEM مشخص گردید که در درصدهای وزنی بالای نانوذرات سیلیکا، این نانوذرات تمایل به جمع شدن دارند. نتایج طیف سنجی مادون قرمز نشان داد که شاخص پیوند هیدروژنی در درصدهای بالای وزنی نانوذرات سیلیکا، کاهش می یابد. واژههای کلیدی: پلی یورتان، سیلیکا، پیوند هیدروژنی

## Detecting of Hydrogen Bonding Intensity of Soft Polyurethane (elastomer)-Silica Nanocomposite by FTIR Spectroscopy

#### Nadafan, Marzieh; <u>Majidi, Roya</u>

Department of Physics, Shahid Rajaee Teacher Training University, Tehran

#### Abstract

In this research, polyurethane-silica nanocomposites with different percentages were synthesized and evaluated. The effects of nanoparticles on properties of soft-polyurethane elastomer were examined via scanning electron microscopy (SEM) and Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy. The SEM imaging showed in high percentage of silica, they tend to agglomeration. The results of FTIR spectra showed that by increasing silica percentages, the hydrogen bonding index of samples was decreased.

Keywords: Polyurethane, Silica, Hydrogen bonding

PACS No. 42, 81

مفتول پذیری) و خواص مواد معدنی (سختی، قابلیت تحمل دمایی بالا، ضریب شکست بالا، کشش و...) می شود، ترکیب نانوذرات سیلیکا و پلی یورتان منجر به راه کاری برای صنایع کاربردی مختلف می گردد [۲]. نحوه قرارگیری نانوذرات اضافه شده به بستر خود به تنهایی چالش مهمی برای دانشمندان است. شاخصی که در این راستا می تواند به محققین کمک بسزایی کند، شدت پیوندهای هیدروژنی بین اتمهای قسمتهای مختلف پلی یورتان (پلی یول-ایزوسیانات) می باشد. هر چه این شاخص در قسمتی از پلی یورتان

مقدمه

یک پلییورتان را میتوان پلیمری دانست که یک جزء یورتان (کربامید) به یک زنجیره از واحدهای آلی متصل شده است. تمام پلییورتانها شامل دو یا تعداد بیشتری گروه ایزوسیانات و دو گروه یا بیشتر هیدروکسیل هستند. الکل و ایزوسیانات یک اتصال یورتانی را بوجود میآورند [۱]. از آنجا که نانوکامپوزیتهای آلی-معدنی باعث ترکیبی از خواص پلیمرهای آلی (انعطاف پذیری و



دقيقه بخوبي تركيب مي شوند. هيچگونه گرمادهي در فرآيند ساخت فوم نياز نيست [٤]. واكنش پليمر شدن بلافاصله پس از هم زدن شروع می شود و بطور همزمان، فرایند فومسازی در نتیجه توليد گاز دىاكسيد كربن آغاز مىشود. اين واكنش،ها شامل اندرکنش های همزمان ایزوسیانات-آب و ایزوسیانات-پلی یول است. در اندرکنش ایزوسیانات با عامل پفکنندگی علاوه بر تشکیل اوره که پایه بخش های سخت فوم است گاز CO<sub>2</sub> نیز توليد مىشود كه باعث انبساط فوم مىگردد لذا به اين اندركنش، پفکردن<sup>٦</sup> گویند. در حالیکه در اندرکنش پلییول-ایزوسیانات، یک گروه ایزوسیانات با یک گروه پایانهای هیدروکسیل از پلی یول اندرکنش میدهد و اتصالات یورتان را تشکیل میدهد که با ایجاد پیوندهای کووالانسی، بخشهای سخت اوره را به بخشهای نرم پلی یول پیوند می دهد و به این اندرکنش، لختگی ۷ گویند. حرارت-زایی های مربوط به این اندرکنش ها همراه با تولید گاز CO<sub>2</sub> به انبساط فوم کمک میکند و ساختار سلول نهایی را تشکیل میدهد. در این مقیاس، اندازه سلولهای فوم انعطافپذیر پلییورتان نوعا در حدود چند صد میکرومتر است. در حالیکه توسعه ریخت-شناسی فوم در طول مقیاس هایی بسیار کوچک تر از ساختار سلول-ها در نوارهای نازک اتصال دهندهی آنها صورت می گیرد [٤]. اندرکنش پلی یول با ایزوسیانات در شکل (۱) نشان داده شده است.

برای ساخت نمونه های نانو کامپوزیت پلی یورتان-سیلیکا، از نانواکسید آماده ساخت شرکت US-Research Nanomaterials آمریکا با مشخصات کروی شکل، ۱۵ nm ۲۰۰، بی شکل با خلوص ۵.//۹۹ و ۲/۶ g/cm<sup>3</sup> ۲/۶ (US-3436) استفاده شد.

برای تهیه نانوکامپوزیت پلی یورتان-نانوذرات سیلیکا ابتدا حجم لازم (نسبت پلی یول به ایزوسیانات ۱:۱) معادل یک سیسی از مولفه A را داخل لوله آزمایش ۵۰ میلی لیتری می ریزیم سپس درصدهای وزنی (٪۱، ٪۱/۵ و ٪۲ وزنی) از این نانوذرات را درون لوله آزمایش ریخته و توسط یک همزن قوی IKA-Germany) نوبی نانوذرات در محلول پخش گردند. سپس سرعت همزن را به قوی تر باشد، پیوندهای هیدروزنی مربوط به آن قسمت محکم تر خواهد بود. بنابراین برای اضافه شدن نانو ذرات و یا بطور کلی ناخالصی به این قسمت و ایجاد پیوند بین اتمهای این قسمت و نانوذرات، احتیاج به انرژی بیشتری خواهد بود. با کنترل میزان نانوذرات اضافه شده به بستر، می توان مکان نهایی نانوذرات و تاثیر آنها بر ساختار بستر را ارزیابی و کنترل کرد.

در این تحقیق ابتدا ریخت شناسی سطحی نانوکامپوزیت پلی یورتان – سیلیکا با استفاده از تصاویر SEM و سپس بررسی تغییرات ساختاری پلیمر قبل و بعد از افزودن نانوذرات سیلیکا با استفاده از طیفسنجی مادون قرمز مدنظر قرار خواهد گرفت.

## روشهای تجربی

مواد اولیه برای ساخت فومهای پلییورتان عبارتند از پلی-ايزوسيانات'، پلييول'، عامل پفكنندگي"، كاتاليست<sup>،</sup> و سرفكتنت [٣]. مواد فوم در تركيب تجارى شامل دو مولفه است: مولفه A و مولفه B که هر دو به شکل مایع هستند و از شرکت اکسون یناه ایران با نام تجاری (SROC: semi rigid open cell) RCC: rigid close cell) & بدون هیچ گونه افزودنی تجاری تهيه شدند. مولفه A شامل پلييول، عامل پفكنندگي، كاتاليست و سرفکتنت است. پلیاتر پلییول که در ساخت انواع فومهای پلی-يورتان انعطافپذير، نيمه انعطافپذير و سخت بكار ميرود. در اينجا آب به عنوان عامل پفكنندگي در پلي يورتان انتخاب شده-است [۳]. مولفه B پلیایزوسیانات است که دی فنیل متان دی– ایزوسیانات انتخاب شده است [۳]. برای ساخت فومهای پلی-يورتان معمولا از روش تک-مرحلهای استفاده می شود. این فرآیند هم برای ساخت فومهای انعطاف پذیر و هم برای ساخت فومهای سخت استفاده می شود [۳]. برای ساخت فوم پلی یورتان خالص، مولفه های A و B به نسبت حجمی یک به یک در قالبی استوانه ای و در–باز در دمای اتاق به مدت ۱۰ ثانیه با سرعت ۲۰۰۰ دور بر

<sup>6</sup> Catalyst

<sup>&</sup>lt;sup>7</sup> Blow

<sup>&</sup>lt;sup>v</sup> Gelation

<sup>&#</sup>x27; Polyisocyanate

<sup>&</sup>lt;sup>°</sup> Polyol

<sup>&</sup>quot; Blowing agent

<sup>&</sup>lt;sup>a</sup> Surfactant



۲۰۰۰- ۱۸۰۰ دور بر دقیقه رسانده و مولفه B را اضافه میکنیم. حدود ۵ الی ٦ ثانیه سرعت دستگاه را در ۲۰۰۰ دور بر دقیقه ثابت نگه داشته تا اختلاط یکنواختی از اجزاء صورت گیرد و بعد همزن خاموش میشود. محلول به صورت فوم منبسط شده در آمده و در مدت ۱۰ الی ۱۲ ثانیه واکنش تکمیل میگردد.

## نتایج تجربی و بحث

شکلهای ۱ و ۲ مربوط به نانوکامپوزیت پلییورتان-سیلیکا است که تفاوت در مقدار درصدهای وزنی سیلیکا در بستر پلی-یورتان کاملا مشهود است. با توجه به افزوده شدن نانوذرات سیلیکا از ۱ درصد به بالا، تجمع نانوذرات در بستر پلی یورتان کاملا قابل رویت است. لذا انتظار میرود نتایج درصدهای بالای نانوذرات سیلیکا در پلی یورتان از نتایج درصدهای پایین آن کاملا متفاوت گردد. با توجه به تصاویر سطح مقطع نانوکامپوزیت فوق و پخش شدگی تقریبا همگن نانوذرات درون پلییورتان، میتوان این امر را به پیوندهای کووالانسی برقرار شده بین زنجیرهی پلیمری و نانوذرات ارتباط داد. البته در درصدهای وزنی بالاتر از سیلیکا (بطور مثال %۲۰۰ wt.) برخی تجمع نانوذرات سیلیکا مشاهده



شکل ۱ : تصاویر SEM از نانوکامپوزیتهای پلییورتان سلول باز با درصدهای وزنی مختلف (a) 1.0، (d) 1.5 و (c) 2.0 از نانوذرات سیلیکا



شکل ۲: تصاویر SEM از نانوکامپوزیتهای پلییورتان سلول باز با درصد وزنی %2.0 wt سیلیکا با بزرگنماییهای (a) 150×، (b) 500×، (c) 1500×، (c) ×00 k (d) ×6 k (d) 45×، (c) 10× و (f) 25×

طیف FTIR از نمونهها که حداکثر نیم درصد از آنها با ماده KBr مخلوط و به شکل قرص درآمده تا نور بتواند از آن عبور کند، با دستگاه (USA) Nexus-Thermo Nicolet-670 در مد عبوری بدست آمدهاند. این دستگاه قادر به طیفسنجی در بازه حدودا <sup>1-400</sup> 4000 cm.

شکلهای ۳ و ٤ طیف FTIR فوم پلی یورتان خالص و نیز فوم با درصدهای وزنی مختلفی از نانوذرات سیلیکا را در مد جذبی، به ترتیب در بازه <sup>1-1</sup>1300 cm نشان می دهد.



شکل ۳: طیف FTIR فوم پلییورتان خالص و نانوکامپوزیت آن با درصدهای وزنی مختلفی از نانوذرات سیلیکا در بازهی <sup>-1</sup> 450-2000 cm

1590-1615 cm<sup>-1</sup> و 1000-1100 cm<sup>-1</sup>, 704 cm<sup>-1</sup> و  $^{1}$  stable of the stable of the



سیلیکا می توانند پیوندهای بین سلولی اضافهای را در فوم ایجاد کنند.

جدایی فاز، عاملی مهم بر مشخصات فیزیکی فومهای پلی-یورتان است. درجه جدایی فاز را میتوان با استفاده از روش کوپر ۸ تخمین زد [۸]. تشکیل پیوندهای هیدروژنی بوسیله گروه – C=O را میتوان با تعیین موقعیت قله <sup>1-</sup>180 cm برای پیوند هیدروژنی O=O–و قله <sup>1-</sup>1720 cm برای O=O–آزاد تعیین کرد.



شکل ٤: طیف FTIR فوم پلی یورتان خالص و نانوکامپوزیت آن با درصدهای وزنی مختلفی از نانوذرات سیلیکا در بازهی <sup>1-1</sup>300-4000 cm

با اندازه گیری شدت قله این دو گروه کربونیل می توان درجه پیوند هیدروژنی را تخمین زد. شاخص پیوند هیدروژنی ۹، R، را می توان نسبت دو قله جذب، R=Abonded/Afree تعریف کرد 1680 cm<sup>-1</sup> می توان نسبت دو قله جذب، شدت قله جذب در 1-1680 cm و 1-20 cm 1720 cm به ترتیب، شدت قله جذب در 1-20 cm و 1-20 cm 1720 است. درجه جدایی فاز ۱ (DPS) را می توان با معادله (1+R)/R=R/دست آورد [۸]. نتایج نشان می دهد که با افزایش R در نمونه های نانوکامپوزیتی، نانوذرات سیلیکا تمایل بیشتری به پخششدگی در قسمت پلی یول پلی یورتان دارند که این امر با ایجاد پیوند هیدروژنی بین سیلیکا و گروههای هیدروکسیل شاخص پیوند هیدروژنی و درجه جدایی فاز نانوکامپوزیتهای در [۸]. شاخص پیوند از ۲۰۵ این افزایش در صد وزنی سیلیکا درون پلی یورتان سلول باز –سیلیکا با افزایش درصد وزنی سیلیکا درون

<sup>8</sup> Cooper method

<sup>9</sup> Hydrogen bonding index

<sup>10</sup> Degree of phase separation (DPS)

افزایش بیشتر درصد وزنی سیلیکا از %.tw 1.0 تا %.tw 2.0 هـر دو پارامتر کاهش می یابند. نتایج بدست آمده در جدول ۱ آمده است. با توجه به نتایج حاصل شده می توان ادعا کرد که نانوذرات سیلیکا در درصدهای وزنی پایین تمایل بیشتری به پخش شدن درون قسمت پلی یول پلی یورتان یا قسمت نرم پلی یورتان را دارند در حالی که با افزایش درصد وزنی سیلیکا این نانوذرات تمایل بیشتری به توزیع درون قسمت سخت یا قسمت ایزوسیانات پلی-یورتان را دارند.

جدول۱ : پارامترهای شاخص پیوند هیدروژنی و درجه جدایی فاز برای فومهای پلییورتان سلول باز-سیلیکا

Sample	R	DPS
blank PUOC	0.988	0.496
PU-1 wt.% SiO <sub>2</sub>	1.00	0.500
PU-1.5 wt.% SiO <sub>2</sub>	0.988	0.497
PU-2 wt.% SiO <sub>2</sub>	0.978	0.495

## نتيجه گيري

با افزایش درصد وزنی سیلیکا درون پلییورتان از %.00 wt تا %.00 wt و در تا %.20 wt میزان توزیع آن نانوذرات متفاوت است و در درصدهای بالا تجمع نانوذرات مشهود می شود. شاخص پیوند هیدروژنی و درجه جدایی فاز نانوکامپوزیتهای پلییورتان سلول باز-سیلیکا با افزایش درصد وزنی سیلیکا درون پلییورتان از 0.0 %.wt تا %.10 wt افزایش مییابد اما با افزایش بیشتر درصد وزنی سیلیکا از %.wt تا %.wt 2.0 هر دو پارامتر کاهش مییابند.

مرجعها [1] Y. Yang, et al., Determination of the cross linking temperature of the thermally cross linkable polyurethane by attenuated total reflection

spectrum, *Opt. Commun.* 272, (2007) 383–386.
[2] Y. Yang, et al., Fabrication and characteristics of thermal cross linking polyurethane integrated double-channel electro-optic modulator, *Opt. Laser Technol.* 39, (2007) 1008–1013.

[3] K. Ashida, *Polyurethane and Related Foams: Chemistry and Technology*, Newyork: Taylor & Francis group, (2007).

[4] D. W. Hatchett, et al., FTIR analysis of thermally processed PU foam, *Polym. Degrad. Stab.* 87, (2005) 555-561.

[5] J.L. Rivera-Armenta, et al., New polyurethane foams modified with cellulose derivatives, *Eur. Polym. J.* **40**, (2004) 2803-2812.

[6] S. Parnell, et al., Kinetic studies of polyurethane polymerization with Raman spectroscopy, *Polymer* 44, (2003) 5137-5144.

[7] R.C.S. Araujo, et al., Effects of biopitch on the properties of flexible polyurethane foams, *Eur. Polym. J.* **41**, (2005), 1420-1428.

[8] H. Xia, M. and Song, Preparation and characterization of polyurethane–carbon nanotube composites, *Soft Matter* **1**, (2005), 386-394.





## ساخت و مشخصه یابی نانو کامپوزیت های فریت منگنز /اکسید آهن

معاذالهی، آرزو؛ سیدیزدی، جمیله؛ ابراهیمی تزنگی، فاطمه گروه فیزیک دانشگاه ولی عصر (عج) رفسنجان

#### چکیدہ

در این پژوهش نانوکامپوزیتهای فریت منگنز/کسیدآهن به روش هیدروترمال فرآوری شده است. ساختار بلوری، اندازه متوسط و مورفولوژی نمونهها توسط مشخصهیابی XRD,VSM و XED بررسی شدهاند. نتایج بدست آمده نشان میدهد که نانوکامپوزیت مغناطیسی فرآوری شده MnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>-Fe<sub>3</sub>O4 دارای اشباع مغناطیسی VIv 4 emu/g و میدان وادارندگی در حدود OP است.

واژه های کلیدی: نانوکامپوزیت های مغناطیسی، اکسید آهن، فریت منگنز، روش هیدروترمال.

#### Synthesis and characterization of manganese ferrite/iron oxide nanocomposites

#### Maazallahi, Arezoo; Seyedyazdi, Jamileh; Ebrahimi-Tazangi, Fatemeh

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

#### Abstract

In this research, manganese ferrite/iron oxide nanocomposites have been synthesized by hydrothermal method. The crystal structure, average size and morphology of the samples have been investigated by XRD, VSM, FTIR and SEM characterization techniques. The obtained results show that the synthesized magnetic nanocomposites  $MnFe_2O_4$ - $Fe_3O_4$  has the magnetic saturation ~76.09 emu/g and coercivity ~75 Oe.

Keywords: Magnetic nanocomposites, Iron oxide, Manganese ferrite, Hydrothermal method.

مگنتیت، Fe<sub>3</sub>O4، دارای ساختار اسپینل معکوس مکعبی با آنیونهای اکسیژن است که یک ساختار مکعبی مرکزدار (یا مکعبی تنگ پکیده) است [**٦–٥**]. از آنجاییکه نانوذرات Fe<sub>3</sub>O4 خالص به دلیل مساحت سطح ویژه بالا و جاذبه مغناطیسی قوی تمایل به تجمع دارند، این امر آنها را برای کاربردهای تکنولوژیکی نامناسب میسازد. جهت رفع این مشکل مگنتیت را با مواد دیگر ترکیب کرده و مواد کامپوزیت را تشکیل میدهند [۷–۹].

مقدمه

در دهههای گذشته، نانوساختارهای مغناطیسی با ساختار اسپینلی در دهههای گذشته، نانوساختارهای مغناطیسی با ساختار اسپینلی سورد MFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (M = Fe, Co, Ni, Mn, Zn) توجه قرار گرفتهاند. در این میان نانوکامپوزیتهای مغناطیسی بر پایه فریت منگنز (MnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>) به دلیل مزایایی چون وزن سبک، هزینه کم، انعطاف پذیری، اشباع مغناطیسی بالا، پایداری محیطی و فعالیت الکتروشیمیایی عالی در زمینههایی چون مواد جاذب امواج الکترومغناطیسی، ابرخازنها و غیره مورد توجه قرار گرفتهاند [1-



#### ساخت MnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>

ابتدا ۲٫۷ گرم کلرید آهن و ۲۰٬۰گرم کلرید منگنز با ۷۰ میلیلیتر آب یونزدایی شده مخلوط گردید و به مدت ۲۰ دقیقه روی همزن معناطیسی قرار داده شد تا به خوبی همگن شود. سپس ۲٫۳۰ گرم سدیم هیدروکسید به ماده اضافه شد تا pH ماده به ۱۱ برسد (مادهای به رنگ قهوهای به دست میآید). محلول به دست آمده را داخل دستگاه آلتراسونیک گذاشته تا محلول همگنی بدست آید و بعد از چند دقیقه ماده را داخل اتوکلاو گذاشته و به مدت ۲ ساعت در دمای  $2^{\circ}$  ۱۸۰ در آون قرار داده می شود. در آخر محصول نهایی به وسیله آهنربا و آب یونزدایی شده و اتانول چندین مرتبه شسته شده و در دمای  $2^{\circ}$  ۲۰ به مدت ۵ ساعت در آون خشک شد.

#### ساخت MnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>-Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>

در این مرحله ۱۰/۱۵ گرم از محصول بدست آمده از مرحله قبل با ۰۰ میلی لیتر آب یون زدایی شده مخلوط و در بالن سه دهانه ریخته می شود و داخل حمام روغن با دمای  $2^{\circ}$  ۹۰ تحت گاز  $N_2$  قرار می گیرد. ماده تحت این شرایط چند دقیقه هم زده می شود تا مخلوطی همگن به دست آید. سپس ۲٬۰۵ گرم FeCl3 به ماده اضافه شده و به مدت چند دقیقه هم زده می شود. بعد از آن ۰۸، گرم FeCl2 به آن اضافه کرده و چند دقیقه زمان داده می شود تا ماده همگن شود. پس از ۱۰ دقیقه ٤ میلی لیتر آمونیاک را به ماده اضافه کرده و به مدت سه ساعت در حمام روغن قرار داده می شود. سپس با آهنربا شستشو داده شد تا HP ماده برابر هفت شود در آخر در دمای  $2^{\circ}$  ۲۰ به مدت ۵ ساعت در آون خشک می شود.

## نتايج و بحث

(1)

در تحلیل 'XRD نمونه فرآوری شده قله °۴٤/۹۹ مرتبط با صفحه (۳۱۱)، نسبت به قلههای دیگر شدیدتر است که مربوط به MnFe<sub>2</sub>O4 است. قلههای  $\theta$ <sup>T</sup> = ۲۹/۷۳, ۲۰/۵۳, ۵۵/۲۵, ۰۲/۵۰ (۵۱/۲ به ترتیب مربوط به صفحات (۲۲۰)، (۳۱۱)، (۲۰۰)، (۵۱) MnFe<sub>2</sub>O4 به صفحات (۲۲۰)، (۳۱۱)، (۲۰۰)، (۵۱) و (٤٤٤) که مشخص کننده ساختار اسپینل مکعبی ۸۳/۲۵ میباشند. قلههای ۲۰/۰۳, ۳۵/۵۵، ۳۰/۳۱، ۲۵/۵۰ به ترتیب میباشند. قلههای ۲۰/۰۳, ۵۵/۵۱، ۳۰/۵۱ و (٤٤٠) مربوط بوده و میباشند. قلههای ۲۰/۰۳, ۱۱۱۱)، (۲۰۰۱) و (٤٤۰) مربوط بوده و ساختار بلوری ۲۵/۵۹ را تأیید میکنند. شدیدترین قلهها نشان ساختار بلوری ۲۹٬۵۰۵ را تأیید میکنند. شدیدترین قلهها نشان ماداد کدام صفحات بلوری رشد کردهاند. نمونه فرآوری شده دهنده این امر هستند که بلورکها در نانومواد فرآوری شده در امتداد کدام صفحات بلوری رشد کردهاند. نمونه فرآوری شده مادرای ساختار اسپینل مکعبی است و همچنین میانگین اندازه بلورکهای آن ٤٠ نانومتر است که با توجه به رابطهی دبای شرر (معادله ۱) بدست میآید (شکل ۱). X ثابت است، A طول موج پرتو ایکس،  $\beta$  عرض قله در نیم ارتفاع و  $\theta$  زاویه پراش است.



$$\mathbf{D} = \mathbf{K}\lambda/\beta\mathbf{cos}\theta$$

1 X-Ray diffraction

څانشگان پیکینیکی بیکینیکی

> مغناطش نمونه ا با استفاده از مغناطیس سنج ارتعاشی از تحلیل نتایج <sup>۲</sup>NSM بدست آمده است. منحنی بدست آمده S شکل است که دارای میدان وادارندگی Oe می باشد. مقدار مغناظش اشباع نمونه های سنتز شده MnFe<sub>2</sub>O4-Fe<sub>3</sub>O4 و MnFe<sub>2</sub>O4-Fe<sub>3</sub>O4 به ترتیب نمونه های سنتز شده ۷۹٫۰۹ و ۷۱/۰۸ و ۷۲/۰۸ مقدار اشباع مغناطیسی نسبت به فریت منگنز تنها افزایش یافت (شکل ۲).



شكل ۲: منحنى پسماند مغناطيسى a) نانوذرات MnFe2O4 و b) نانوكامپوزيت MnFe2O4-Fe3O4

توزیع اندازه یکنواخت نانوذرات MnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>-Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> توسط <sup>۳</sup> توزیع اندازه یکنواخت نانوذرات را به وضوح مشاهده کرد که به دلیل خاصیت مغناطیسی، ذرات تمایل به تجمع دارند و همچنین تصویر مربوطه نشان میدهد که نانوذرات فرآوری شده کروی و با اندازه متوسطی در حدود ۲۰ نانومتر هستند که در تطابق خوبی با نتایج تحلیل پراش پرتوی ایکس برای تخمین میانگین اندازه بلورکها می باشد (شکل ۳).



شكل ٣: تصوير FESEM نانوكامپوزيت MnFe2O4-Fe3O4



شكل ٤: نمودار EDS نانوكامپوزيت ۸۹-MnFe<sub>2</sub>O4-Fe<sub>3</sub>O4

در تحلیل <sup>3</sup>EDS به وضوح قلههای مربوط به عناصر آهن، منگنز، اکسیژن، نیتروژن و کربن قابل مشاهده است، بنابراین نتایج به دست آمده مطابق با ترکیبات ساخته شده و عدم وجود ناخالصی میباشد. با توجه به نتایج حاصل از این تحلیل ترکیب ساختاری کامپوزیت ساخته شده با عناصر مشخص شده در طیف مربوط همخوانی دارد (شکل ٤).

<sup>4</sup> Energy Dispersive X-ray

<sup>2</sup> Vibrating Sample Magnetometer

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Field Emission Scanning Electron Microscope



## مرجعها

[1] H. M. Xiao, X. M. Liu, and S. Y. Fu, "Synthesis, magnetic and microwave absorbing properties of core-shell structured  $MnFe_2O_4/TiO_2$  nanocomposites," Composites Science and Technology, vol. 66, no. 13, pp. 2003–2008, 2006.

[2] S. H. Hosseini, S. H. Mohseni, A. Asadnia, and H. Kerdari, "Synthesis and microwave absorbing properties of polyaniline/MnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> nanocomposite," Journal of Alloys and Compounds, vol. 509, no. 14, pp. 4682–4687, 2011.

[3] Thu, T. V., Van Nguyen, T., Le, X. D., Le, T. S., Van Thuy, V., Huy, T. Q., & Truong, Q. D. (2019). Graphene-MnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>-polypyrrole ternary hybrids with synergistic effect for supercapacitor electrode. Electrochimica Acta, 314, 151-160.

[4] Yadav, R. S., Jamatia, T., Kuřitka, I., Vilčáková, J., Škoda, D., Urbánek, P., ... & Havlica, J. (2020). Excellent, lightweight and flexible electromagnetic interference shielding nanocomposites based on polypropylene with  $MnFe_2O_4$  spinel ferrite nanoparticles and reduced graphene oxide. Nanomaterials, 10(12), 2481.

[5] F. Ebrahimi-Tazangi, J. Seyed-Yazdi, H. Hekmatara,  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>@CoFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/GO nanocomposites for broadband microwave absorption by surface/interface effects, Journal of Alloys and Compounds 900 (2022).

[6] D. Wang, H. Duan, J. Lü, C. Lü, Fabrication of thermoresponsive polymer functionalized reduced graphene oxide@Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>@Au magnetic nanocomposites for enhanced catalytic applications, J. Mater. Chem. A 5 (2017) 5088e5097, <u>https://doi.org/10.1039/C6TA09772C</u>.

[7] G. D. Tang, Z.Z. Li, L. Ma, W.H. Qi, L.Q. Wu, X.S. Ge, G.H. Wu, F.X. Hu, Three models of magnetic ordering in typical magnetic materials, Phys. Rep. 758 (2018) 1e56

[8] S. M. Fotukian, A. Barati, M. Soleymani, A.M. Alizadeh, Solvothermal synthesis of CuFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> and Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> nanoparticles with high heating efficiency for magnetic hyperthermia application, J. Alloys Compd. 816 (2020), 152548, <u>https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.152548</u>.

[9] M. Green, Z. Liu, P. Xiang, Y. Liu, M. Zhou, X. Tan, F. Huang, L. Liu, X. Chen, Doped, conductive SiO<sub>2</sub> nanoparticles for large microwave absorption, Light Sci. Appl. 7 (2018) 1e9, https://doi.org/10.1038/s41377-018-0088-8.

در تحلیل تبدیل فوریه فروسرخ یا °FTIR مربوط به نانوذرات MnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>-Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> و MnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> قله جذبی <sup>1-</sup>m۵ ۳٤٥٥ به گروه ارتعاشی کششی H-O مولکولهای سطح آب جذب شده روی نمونه مربوط میشوند وقلههای <sup>1-</sup>H۹ cm اروماتیک C=C میباشند و پیوندهای اکسیژن-فلز در محدودهی <sup>1-</sup>m۰ ۵۷۰ مربوط به پیوندهای G-P و Mn-O است که حضور فریت منگنز و اکسید آهن را در ترکیب فرآوری شده تأیید میکند (شکل ۵).



شكل ٥: تحليل تبديل فوريهى فروسرخ نانوذارات MnFe2O4 و نانوكامپوزيت MnFe2O4-Fe3O4

## نتيجه گيري

نتایج به دست آمده نشان میدهند که بین نانوذرات مغناطیسی فرآوری شده به روش هیدروترمال، نانوکامپوزیت مغناطیسی MnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>-Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> دارای اشباع مغناطیسی ۷٦,۰۹ emu/g و میدان وادارندگی Oo میباشد.

5 Fourier-Transform Infrared





مقدمه

## سنتز و مشخصهیابی نانوکرههای مرجانی NiCo2O4

مهدی زاده، یوسف؛ سیدیزدی، جمیله؛ ابراهیمی تزنگی، فاطمه؛ مالکی مقدم، میلاد گروه فیزیک دانشگاه ولی عصر (عج) رفسنجان

#### چکیدہ

نوع جدیدی از فریتها؛ اسپیل نیکل کبالت (NiCo2O4) میباشد. این ماده به علت مزایایی که دارد میتواند گزینهی مناسبی برای کاربردهای جاذب امواج اکترومغناطیسی و ابرخازنی باشد. در این پژوهش، ابتدا با استفاده از روش هیدروترمال نانوساختار مورد نظر با ریختشناسی نانوکرههای مرجانی سنتز شد. درنهایت ساختار و ویژگیهای آن مشخصهیابی شد.

واژه های کلیدی: فریت ها، روش هیدروتر مال، نانوساختار.

#### Synthesis and properties of NiCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub> coral nanospheres

#### Yousef, Mehdizadeh; Seyedyazdi, Jamileh; Ebrahimi Tazagi, Fatemeh; Maleki Moghaddam, Milad

Department of Physics, Faculty of science, University of Vali-e-Asr Rafsanjan

#### Abstract

A new type of ferrite is nickel cobalt spinel (NiCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub>). Due to its advantages, this material can be a suitable option for electromagnetic wave absorber and supercapacitor applications. In this work, using the hydrothermal method a nanostructure with the morphology of coral Nano spheres was synthesized. Then its structure and characteristics were characterized. **Keywords**: Ferrites, Hydrothermal, Nanostructure.

PACS No. (75.20)

مقاومت الکتروشیمیایی مناسب گزینه مناسبی در کاربرد ابرخازنها میباشند [۳].

#### روش سنتز NiCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub> :

در این کار از روش سنتز هیدروترمال استفاده شد که در ادامه مراحل آن بیان می شود. مقدار معینی از پیش مادههای کبالت و نیکل، به مدت ۱۰ دقیقه تحت هم زدن مغناطیسی قرار گرفت و محلول یون فلزی به دست آمد. سپس ۲٫۰ میلیمول گلوکز و ۱۸٫۰ گرم اوره اضافه و به ۱۵ دقیقه هم زده شد. پس از آن، محلول به اتوکلاو منتقل و به مدت ۲۰ ساعت در دمای ۱۸۰ درجه فریتها به عنوان مواد جاذب سنتی، علیرغم مزیت کم هزینه بودن، گستردگی منابع مواد خام و مقاومت در برابر خوردگی قوی، از معایب چگالی بالا و پهنای باند جذب باریک رنج می برند. اسپینل نیکل کبالت NiCo2O4، نوع جدیدی از مواد فریت است که به دلیل مزایای برجسته مورفولوژی قابل کنترل، ساختارهای متخلخل، توانایی قطبش بالا و همچنین ناهمسانگردی شکل عالی، یک ماده جاذب امواج الکترومغناطیسی امیدوارکننده برای دستیابی به ضخامتهای نازک و پهنای باند جذب بالا است [او۲]. همچنین به خاطر خواص اکسیداسیون متفاوت، پایداری گرمایی و



سلسیوس قرار داده شد. فراوردههای واکنش با استفاده از آب دیونیزه و اتانول خالص شسته و ماده در دمای اتاق خشک گردید. در نهایت، فراورده ها در فشار جو در کوره به مدت ۲ ساعت بازيخت شدند.

## مشخصه يابي:

نمونه سنتز شده جهت تعيين ساختار، مورفولوژي و ويژگي هاي مغناطیسی توسط آنالیزهای مربوطه مشخصه یابی شد.

#### آنالیز پراش پرتوی ایکس ('XRD):

ساختار کریستالی نمونه در شکل ۱ آمده است. قلههای پراش در زوايای ۳۱٫۲°، ۳٦٫۷°، ۳۸٫٤°، ۴٤٫٦°، ۵٥٫٤°، ۵۹٫۲°، ۲۰٫۵° که به ترتيب با صفحات شبکه بلوری (۲۲۰)، (۳۱۱)، (۲۲۲)، (٤٠٠)، (٤٢٢)، (٥١١)، (٤٤٠) متناظرند. به طوری که این قله ها با الگوی یراش استاندارد NiCo2O4 اسیینل مکعبی مطابقت دارد. تمام قلههای پراش نشاندهنده تبلور خوب نمونه بدست آمده است. هیچ قله پراش اضافی که معرف ورود ناخالصبی به نمونیه باشد شناسایی نشد که این امر تأیید کننده سنتر ماده با خلوص بالا مىباشد.



شکل ۱: آنالیز پراش پرتوی ایکس مربوط به نمونه NiCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub>

## آناليز ميكروسكوب الكتروني روبشي ('SEM)

مورفولوژی نمونه توسط تصاویر بدست آمده از SEM مشخص گردید. با توجه به شکل ۲ می توان تأیید کرد که نمونه سنتز شده به صورت نانوکرههای مرجانی NiCo<sub>2</sub>O4 با قطر تقریبی بین ٤٥ تـا ٦٥ نانومتر به دست آمده است.



شکل ۲ : تصویر SEM از نمونه سنتز شده NiCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub>.

#### طيفسنجي تبديل فوريه فروسرخ (FTIR<sup>®</sup>):

همچنین جهت تکمیل فرایند مشخصه یابی از نمونه سنتز شده، آنالیز FTIR بررسی شد. همانطور که در شکل ۳ آمده است؛ از سمت راست دو قله نوک تیز در محدودههای نواری cm<sup>-1</sup> ۵۷۷ و Ni-O مشاهده گردید که به ترتیب با پیوندهای C-O و C-متناظرند. این پیوندها، به پیوندهای اکسیژن فلز معروفند. همچنین نوار عبوری قوی در ۱۳۷۰ cm<sup>-1</sup> قابل رؤیت است که به ارتعاش -NO3 نسبت داده می شود [۳]. علاوه براین وجود قلههایی در محـدودههای نـواری ۱۹۰۰ cm<sup>-1</sup> و ۳٤۰۰ cm<sup>-1</sup> بـه ترتیـب بـا حالتهای کششی و خمشی ییوند O-H مولکول های آب جذب شده مطابقت دارد [٤و٥].

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Scanning Electron Microscope

<sup>3</sup> Fourier-Transform Infrared

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> X-Ray Diffraction





شکل ٥: أناليز VSM نمونه سنتز شده NiCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub>

نتیجه گیری:

در پژوهش حاضر نانوکرههای مرجانی NiCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub> با روش هیدروترمال سنتز شد. نمونه سنتز شده جهت تعیین ساختار و ویژگیهای آن مشخصهیابی شد. دادههای حاصل از XRD نشان دهنده تبلور خوب و سنتز با خلوص بالا میباشد. همچنین آنالیز SEM تأیید کرد که نانوکرههای مرجانی NiCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub> با قطر تقریبی بین ٤٥ تا ٦٥ نانومتر سنتز شد. علاوه بر این طیف FTIR وجود پیوندهای اکسیژن فلز را تایید کرد. بنابراین می توان ادعا کرد که نانوکرههای مرجانی با خلوص بالا و تبلور خوب سنتز شد.

مرجعها

- [1] D. Lan, M. Qin, J.L. Liu, G.L. Wu, Y. Zhang and H.J. Wu, "Novel binary cobalt nickel oxide hollowed-out spheres for electromagnetic absorption applications"; Chem. Eng. J. 382 (2020) 122797.
- [Y] H.J. Wu, M. Qin and L.M. Zhang, "NiCo2O4 constructed by different dimensions of building blocks with superior electromagnetic wave absorption performance"; Compos. Part B-Eng. 182 (2020) 107620.
- [\*] Isacfranklin, M., S. Daphine, R. Yuvakkumar, L. Kungumadevi, G. Ravi, Abdullah G. Al-Schemi and Dhayalan Velauthapillai.

 "ZnCo2O4/CNT composite for efficient supercapacitor electrodes"; Ceramics International (2022).
 Sannasi, Veeman and Karuppuchamy Subbian, "High-

- [٤] Sannasi, Veeman and Karuppuchamy Subbian, "Highpseudocapacitance of MnCo2O4 nanostructures prepared by phenolphthalein assisted hydrothermal and microwave methods"; Ceramics International 46, No. 10 (2020): 15510-15520.
- [o] Merabet, Loubna, Kamel Rida and Nawel Boukmouche, "Sol-gel synthesis, characterization, and supercapacitor applications of MCo2O4 (M= Ni, Mn, Cu, Zn) cobaltite spinels"; Ceramics International 44, No. 10 (2018): 11265-11273.



آناليز EDS نمونه

از شکل ٤. آنالیز EDS نمونه، ترکیب عناصر تشکیل دهنـده مـاده سنتز شده دیده میشود. عدم حضور عناصر دیگر حاکی از خلوص نانوساختار سنتز شده میباشد.



#### آنالیز مغناطیسسنج نمونه مرتعش ('VSM):

به خوبی مشخص است که رفتار مغناطیسی نانومواد به شدت تحت تاثیر ریختشناسی و اندازه آنها است. از شکل ۵ مشاهده می شود که نانوساختار NiCo<sub>2</sub>O4 دارای حداکثر مغناطش اشباع ۱/۰۸ emu/g می باشد. همچنین مقدار میدان وادارندگی ۳٤۲/۹۰<sub>Oe</sub> بدست آمد.

<sup>1</sup> Vibrating-Sample Magnetometer





مقدمه

# اثرات نقص و میدان الکتریکی در نانو نوارهای زیگزاگ گرافنی: نظریه تابعی چگالی

استکی ، سمیه ٔ ؛ فرقدان، روح اله ٔ

ا دانشکده فیزیک، دانشگاه کاشان، کاشان

چکیدہ

ما به بررسی اثر نقص تهیجای و میدان الکتریکی، بر خواص الکترونی نانونوارهای زیگزاگی گرافن با رهیافت نظریه تابعی چگالی پرداخته ایم. مغناطش خالص غیرصفرایجاد شده در نانونوار یک رفتار نیمرسانای اسپینی در سیستم ایجاد می کند، این رفتار سبب تولید یک ضریب عبور اسپین-قطبیده می شود. با نقص تهیجای و میدان الکتریکی می توان حالتهای اسپین-قطبیده، خاصیت رسانایی و نیمهرسانایی را روی سطح فرمی کنترل کرد. با کنترل میدان الکتریکی می توان خاصیتهای نیمه فلزی در حضور نقص در نانونوار گرافن ایجاد کرد.

واژه های کلیدی: نانونوارهای گرافنی لبه زیگزاگ ضریب عبور الکترنی، رهیافت نظریه تابعی چگالی، میدان الکتریکی

# Effects of defects and electric field in zigzag graphene nanoribbons: density functional theory

#### Esteki, Somaye<sup>1</sup>; Farghadan, Rouhollah<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, University of kashan, kashan

#### Abstract

We investigated the effect of defect and electric field on the electronic properties of zigzag graphene nanoribbons with the approach of density functional theory. The net non-zero magnetization created in the nanoribbon creates a spin-semiconductor behavior in the system, this behavior produces a spin-polarized transition spectrum. With the defect and electric field, spin-polarized states, conductivity and semi-conductivity can be controlled on the Fermi surface. By controlling the electric field, halfmetallic properties can be created in the presence of defects in graphene nanoribbons, Electron transmission, Density functional theory approach, Electrical Field.

*PACS No.* 70 - 72

در این پژوهش به بررسی خواص الکترونی نانونوارهای زیگزاگی گرافن در حضور میدان الکتریکی پرداختهایم. میتوان نانونوارهای زیگزاگی را به عنوان فیلتر اسپینی به کار برد. در این شبیهسازی، خواص تکنوار زیگزاگ گرافن در حضور برهمکنش اسپین-مدار ذاتی و با استفاده از نظریه تابعی چگالی اسپین-قطبیده مورد مطالعه قرار داده شده است. نتایج نشان میدهند با میدان الکتریکی میتوان گاف انرژی را کنترل کرد. همچنین با تغییر شدت میدان الکتریکی یک نیمهرسانای مغناطیسی در نانونوارهای زیگزاگی گرافن در حضور برهمکنش اسپین-مدار ذاتی خواهیم داشت. علاوه بر این با توجه به تاثیر ناکاملی ساختاری در خواص مغناطیسی، به بررسی نقص تهیجای در نانونوار پرداخته شده است. نتایج نشان میدهد که میتوان گاف انرژی را با میدان الکتریکی کنترل کرد. همچنین

در سالهای اخیر گرافن و سایر مواد دوبعدی نظیر سیلیسن، فسفرن و بروفن توجه بسیاری از محققین علوم مختلف را به خود جلب کرده است. تا کنون مطالعات گسترده ای در زمینهی خواص الکترونی و مغناطیسی صفحات و نانونوارهای گرافن صورت گرفته است. تحرکپذیری بالای نانونوارهای گرافنی در دمای اتاق باعث شده گزینه مناسبی برای ساخت دستگاههای الکترونیکی و اسپینترونیکی باشد [۱]. برهم کنش اسپین-مدار ذاتی اولین بار توسط کین-میل در گرافن مورد بررسی قرار گرفته است [۲]. دراسپینترونیک علاوه بر الکترون از اسپین الکترونها برای ذخیره، انتقال و پردازش اطلاعات استفاده می شود [۳]، مزیت اسپین الکترون نسبت به بارالکتریکی این است که اسپین الکترون با

3.4





شکل ۱. ساختار ZGNR با ۱ سلول واحد که ۲مرتبه تکرار شده ، بـه عنـوان ابرسلول در حضور میدان های عرضی نمایش داده شده است.اتم کربن بـا رنـگ قهوه ای و اتم هیـدروژن بـا رنـگ زرد مشـخص شـده است،شـماتیک نـانونوار زیگزاکی گرافن، الف) بدون نقص و ب) با نقص تهیجای.

برای این نانونوار در حضور میدان الکتریکی شاهدحالت نیمهفلزی<sup>۱</sup> بودیم.

## فرمولبندی یا روش محاسبات

پیکربندی نانونوار زیگزاگ گرافن به منظور بررسی خواص الكتروني و اسپيني، در شكل ۱ ارائه شده است. سلول واحد شامل ۱۰ اتم (۸ اتم کربن و ۲ اتم هیـدروژن در لبـه نانونوار)اسـت. بـا استفاده از نظریه تابعی چگالی ٔ بـه بررسـی خـواص الکترونـی و مغناطیسی نانونوار زیگزاگ گرافن کامل و با نقص، داخل میدان الكتريكي پرداخته شده است. براي محاسبه برهمكنش بين هستهها و الکترونهای ظرفیت از تقریب شبه پتانسیل (FHI) (یک روش تخمینی برای محاسبه شبه پتانسیل، که برای این ساختارها جوابهای مناسبی دارد[٤])و از تقریب چگالی اسپینی موضعی (LSDA) استفاده شده است. توزيع اوليه مغناطيسي (فـرو و أنتـي فـرو مغناطیسی) را برای ساختار عـوض مـیکنیم. بـا حـل خودسـازگار معادلات کوهن-شم به محاسبه ساختار نواری و ضریب عبور الکترونی میپردازیم. در ایـن محاسـبات مجموعـه های پایـه را بـه صورت SZP<sup>2</sup>، و مقدار انرژی قطع 75 Hartree و تعداد نقاط K برای منطقه اول بریلوئن [100 1 1] در نظر گرفتیم. یک فضای خلا به اندازه ۲آنگستروم در راستای محور z در نظر گرفتـه

<sup>1</sup> half metal

<sup>2</sup> Density Functional Theory (DFT)

<sup>3</sup> Fritz-Haber Institute

<sup>4</sup> SingleZetaPolarized

شده است. اتمهای کربن در انتهای لبههای زیگزاگ یک پیوند آزاد دارند، که توسط اتمهای هیدروژن محدود می شوند از این طریق از تاثیر پیوندهای آزاد بر روی خواص الکترونی نانوساختار گرافنی جلوگیری می شود.در بخش زیر، نتایج حاصل از محاسبات عددی انجام شده توسط نرم افزار سیستا را برای ساختارنواری وطیف انتقال انرژی (باتوجه به فرمول ترابرد همدوس لاندائور – بوتیکر محاسبه شده است[٥].) ارائه میدهیم.

## بحث و نتايج

اعمال میدان الکتریکی عرضی منجر به ایجاد مغناطش خالص غیرصفر در لبههای نانونوار زیگزاگ می شود. باتوجه به اینکه مقدار ولتاژ در لبهها متفاوت است و این سبب می شود تا انرژی الکترونها در دو لبه متفاوت شود، و با توجه به اینکه حالتهای جایگزیده مغناطیسی، در لبهها هستند نوارهای انرژی اسپینی از هم جدا می شوند.



شبکل۲: سباختار نبواری مرببوط به نبانونوار زیگزاگی گرافن در حالت پایه فرومغناطیس در میدان الکتریکی، الف) ۱۰۰۸، ب) ۵، ج) ۱۰ و د) ۱۳ الکترونولت.





شکل ۳: ساختار نواری مربوط به نانونوار زیگزاگی گرافن در حالت پایه آنتی فرومغناطیس در میدان الکتریکی با شدتهای مختلف، الف) ۱/۰۸، ب) ۵. ج) ۱۰ و د) ۱۳ الکترون ولت.

در شکل ۲ ساختار نواری مربوط به نانونوار زیگزاگ گرافن در حالت پایه فرومغناطیس، بدون نقص نشان داده شده است. ساختار نواری برای اسپین بالا و پایین، متفاوت است که نشان دهنده خاصیت مغناطیسی میباشد. با افزایش میدان، حالت کراس روی سطح فرمی، شکل۲ (الف)، برای اسپین بالا و پایین تبدیل به حالتهای مسطحی میشوند که روی سطح فرمی قرار دارند که در شکل۲ (ج) میتوان مشاهده کرد. <del>ی</del>ک سری حالتهای جایگزیده روی سطح فرمی قرار میگیرند و هردو حالت اسپینی بالا و پایین را روی سطح فرمی داریم. با افزایش میدان الکتریکی، یک میدان بحرانی خواهیم داشت که به عرض هم بستگی دارد و در این میدان، سیستم غیرمغناطیسی میشود که در شکل۲ (د) نشان داده شده است.

در شکل۳ ساختار نواری نانونوار زیگزاگی گرافن بدون نقص، در حالت پایه آنتیفرومغناطیسی، نشان داده شده است. همانطور که در شکل دیده میشود، یک سری باندها به سطح فرمی نزدیک و یک سری از سطح فرمی دور میشوند. در شکل۳ (ج) نیمهفلزی را



شکل (٤): ساختار نواری مربوط به نانونوار زیگزاکی گرافن در حالت پایه فرومغناطیس در میدان الکتریکی با شدت برابر با ۱/۰۸ الکترون ولت، الف) بدون نقص، ج) با نقص تهی جای. نمودار ضریب عبور برای نانونوار ب) بدون نقص، د) با نقص تهی جای.

در حالت پایه فرومغناطیس در شکل (٤) مشاهده میشود. در شکل٤ (الف)و(ب) ساختار نواری بدون نقص دیده میشود که یک حالت کراس روی سطح فرمی وجود دارد اما در حضور نقص تهیجای، شکل٤ (ج)و(د) حالتهای جایگزیده روی سطح فرمی زیاد میشود که به هردو اسپین بالا و پایین بستگی دارد.



شکل (۵): ساختار نواری مربوط به نانونوار زیگزاکی گرافن در حالت پایه آنتی فرومغناطیس در میدان الکتریکی با شدت برابر با ۰۸/ الکترون ولت الف) بدون نقص، ج) با نقص تهی جای. نمودار ضریب عبور برای نانونوار ب) بدون نقص، د) با نقص تهی جای.

داریم که در آن یک نوع نوار اسپینی روی سطح فرمی قرار دارد. با افزایش بیشتر میدان خاصیت مغناطیسی سیستم محو می شود. نمودار ساختار نواری و ضریب عبور برای نانونوار زیگزاکی گرافن ضریب عبور برای نانونوار بدون نقص متناظر با نوار ضربدری روی سطح فرمی، برابر یک است، شکل ٤ (ب). در حضور نقص







شکل (٦): نمودار ضریب عبور مربوط به نانونوار زیگزاکی گرافن دارای نقص تهیجای در حالت پایه فرومغناطیس در میدان الکتریکی، الـف) ۱/۰۸، ب) ۵، ج) ۱۰ و د) ۱۳ الکترون ولت.

تهی جای، یک سری حالت های اسپینی نسبت به حالت قبل، ضریب عبورشان افزایش مییابد. پس قطبش اسپینی اتفاق میافتد یعنی یک سری الکترون ها نسبت به یک سری دیگر الکترون ها، بیشتر عبور میکنند، شکل ٤ (د).

در شکل (۵)، نمودار ساختار نواری و ضریب عبور برای نانونوار زیگزاکی گرافن در حالت پایه آنتی فرومغناطیس، دیده می شود. ساختار نواری مربوط به نانونوار بدون نقص در سطح فرمی دارای گاف نواری است، شکل ۵ (الف)، متناظر با آن ضریب عبور صفر را روی سطح فرمی داریم، شکل ۵ (ب). همچنین در غیاب نقص، تقارن الکترون-حفره را داریم. ولی در حضور نقص تهی جای حالت های اسپینی بالا و پایین همزمان روی سطح فرمی قرار می گیرند و تقارن الکترون-حفره از بین می رود و یک نوع اسپین نزدیک سطح فرمی قرار می گیرد که در شکل ۵ (ج) و (د) مشاهده می شود.

ضریب عبور الکترونی برای نانونواره ای زیگزاگی گرافن دارای نقص تهیجای در حالت پایه فرومغناطیس، در میدان الکتریکی در شکل7 نشان داده شده است. در شکل7 (الف) و (ب) هر دو حالت اسپینی را روی سطح فرمی داریم ولی با افزایش بیشتر میدان در شکل7 (ج) و (د) می توان حالت نیمهفلزی ایجاد کرد.

برای نانونوارهای زیگزاگی گرافن دارای نقص تهیجای در حالت پایه آنتیفرومغناطیس، در ساختار نواری مربوط به میدان الکتریکی برابر با ۱/۰۸ ولت، گاف نواری داریم که در نمودار ضریب عبور



شکل (۷): نمودار ضریب عبور مربوط به نانونوار زیگزاکی گـرافن دارای نقـص تهیجای در حالت پایه آنتیفرومغناطیس در میدان الکتریکی، الـف) ۱/۰۸، ب) ۵، ج) ۱۰ و د) ۱۳ الکترون ولت.

صورت گاف رسانش روی سطح فرمی دیده می شود، شکل ۷ (الف) با افزایش میدان این گاف رسانش از بین می رود و این نشان می دهد که نوارهای انرژی روی سطح فرمی جابه جا می شوند، شکل ۷ (ب)-(د). ضریب عبور الکترون ها نزدیک سطح فرمی تقارن الکترون-حفره را ندارند و نامنظم هستند، یعنی احتمال عبور یک حالت اسپینی بیشتر از حالت اسپینی دیگر است.

نتيجه گيري

در این کار اثر نقص در نانونوار گرافنی با لبههای زیگزاگ را در حضور میدان الکتریکی، مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان میدهد که خواص الکترونی و مغناطیسی و گاف انرژی را می توان با میدان الکتریکی کنترل کرد. این نانونوار در یک میدان الکتریکی خاص می تواند خاصیت نیمهفلزی پیداکند. با مقایسه نتایج می توان نتیجه گرفت که حالت پایه فرومغناطیس در حضورنقص و میدان الکتریکی برای کاربردهای ترموالکتریک و اسپینترونیک بهتر است. **مرجعها** 

- [1] K. I. Bolotin, K. J. Sikes, Z. Jiang, M. Klima, G. Fudenberg, J. Hone, H. L. Stormer; "Ultrahigh electron mobility in suspended graphene"; *Solid state communications*, **146**(9-10) (2008) 351-355
- state communications, 146(9-10), (2008) 351-355.
  [2] M. Ezawa; "Monolayer topological insulators: silicene, germanene, and stanine"; Journal of the Physical Society of Japan, 84(12), (2015) 121003.
- [3] H. S. Kaushik, A. Sharma, M. Sharma; "Dilute magnetic semiconductor: A review of theoretical status"; *IJIEASR*, (2014) 3, 5-10.
- [4] P. Rivero, V. M. García-Suárez, D. Pereñiguez, K. Utt, Y. Yang, L. Bellaiche, S. Barraza-Lopez; "Systematic pseudopotentials from reference eigenvalue sets for DFT calculations"; *Computational Materials Science*, 98 (2015) 372-389.
- [5] F. M. Mousavi, R. Farghadan; "Electrical control of the spin-Seebeck coefficient in graphene nanoribbons with asymmetric zigzag edge extensions"; *Physical Chemistry Chemical Physics*, 24(44), (2022) 27195-27203.





# اثر عوامل قلیایی بر سنتز شیمیایی نانوذرات مگنتیت و بررسی ویژگیهای ساختاری، اپتیکی و مغناطیسی آنها

سلیمانی فر، سحر؛ سرحدی، رضا؛ حضرتی سعد آبادی، مرضیه گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه بیرجند، بیرجند

## چکیدہ

در این پژوهش، نانوذرات مگتیت Fe3O4 به روش همرسوبی تهیه و تاثیر نوع عامل رسوبدهنده (سدیم هیدروکسید و آمونیوم هیدروکسید) بر ویژگیهای آن ها بررسی شد. نتایج آنالیز XRD شکل گیری فاز اسپینل مکعبی را برای نمونه ساخته شده با آمونیوم هیدروکسید (FOA) نشان میدهد، در حالیکه برای نمونه سنتز شده با سدیم هیدروکسید (FOS)، فاز گوتیت نیز تشکیل شده است. پارامتر شبکه و اندازه بلورکهای نمونههای FOS و FOA به ترتیب از ۱۸۴ به ۸۳۵ آنگستروم و از ۱۲ به ۱۰ نانومتر کاهش مییابد. بر اساس تصاویر FESEA، دانهها کروی شکل میباشند. هر دو نمونه دارای خاصیت ابرپارامغناطیسی بوده، در حالیکه نمونه آنگ دارای مغناطش اشباع بیشتری نسبت به FOS/ست.

واژه های کلیدی: روش همرسوبی، عامل رسوبدهنده، مگنتیت، شکاف انرژی، ابرپارامغناطیس

Influence of precipitating agents on chemical synthesis of magnetite nanoparticles and investigation of their structural, optical and magnetic properties

#### Solymanifar, Sahar; Sarhaddi, Reza; Hazrati Saadabadi, Marzieh

Department of physics, Faculty of sciences, University of Birjand, Birjand

#### Abstract

In this research, the magnetite (Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>) nanoparticles were synthesized by co-precipitation method and the effect of precipitating agent's type (NaOH, NH<sub>4</sub>OH) on their properties was investigated. The results of XRD analysis show the formation of a cubic spinel phase for the sample synthesized by ammonium hydroxide (FOA), whereas for the sample synthesized by sodium hydroxide (FOS), goethite phase also formed. The lattice parameter and crystallites size of FOS and FOA samples decrease from 8.4 to 8.35 Å and 16 to 10 nm, respectively. According to FESEM images, grains are spherical in shape. The both samples have superparamagnetic properties, whereas the saturation magnetization of the FOA sample has the higher value as compared to FOS sample.

Keywords: Co-precipitation method, precipitating agents, magnetite, energy gap, superparamagnetism

PACS No. 75, 81 دهند، به طور گسترده استفاده می شوند [۱]. به دلیل استفاده فراوان از نانوذرات مغناطیسی از جمله اکسیدهای آهن در زیست پزشکی، الکترونیک، کاتالیزور و ...، مطالعات گستردهای در مورد عوامل مختلف مؤثر بر خواص آنها، انجام شده است. یکی از این عوامل، نوع عامل قلیایی در روش هم رسوبی است که در این مقاله، به بررسی اثرات آن بر خواص مختلف نانوذرات مگنتیت، پرداخته شده است.

مقدمه

از بین مواد نانوساختار، نانوذرات اکسید فلزی به دلیل خواص ویژهای که دارند، از جایگاه مهمی برخوردار هستند. در این بین، به خاطر ارزان بودن، سازگاری زیستی خوب، گشتاور مغناطیسی مناسب و پایداری نسبتاً بالایی که اکسید آهن و ترکیبات مربوط به آن در مقایسه با سایر پایههای فلزی نانوذرات از خود نشان می-



جهت تهیه نانوذرات اکسید آهن Fe<sub>3</sub>O4، از روش شیمیایی هم-رسوبی استفاده شد. برای این منظور، در ابتدا مقادیر مناسب از نمکهای FeCl<sub>2</sub>.4H<sub>2</sub>O و Fe(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>.9H<sub>2</sub>O در ۲۰۰ سی سی آب یونزداییشده و در دمای C° ۸۰ حل شدند. سپس بدون تغییر دمای محلول، محلول سدیم هیدروکسید (NaOH) ۱ مولار و آمونیوم هیدروکسید (NH4OH) ۲۵٪ که از قبل آماده شده بود را طی دو آزمایش جداگانه، به صورت قطره قطره و با تناوب زمانی مشخص به محلول حاوی یونهای آهن اضافه کرده به گونهای که pH محلول نهایی در مقدار ۱۲ تنظیم گردید. با اضافه کردن عامل قلیایی، رنگ محلول از قهوهای روشن به سیاه، تغییر رنگ داده و رسوب در ته ظرف تهنشین می شود. در ادامه، رسوب حاصل با کمک آهنربا جمع آوری و چند مرتبه با آب یونزدایی شده شستشو داده شد و در نهایت، به مدت ۱۵ ساعت در دمای C<sup>o</sup> ۹۰ خشک و مشخصهیابی های مختلف بر روی آن، انجام شد. نانوذرات Fe<sub>3</sub>O4 ساخته شده با عوامل قلیایی سدیم هیدروکسید و آمونیوم هیدروکسید، به ترتیب با عبارت FOS و FOA، نامگذاری شدند.

## نتايج و بحث

الگوهای پراش پرتو ایکس (XRD) نانوذرات سنتز شده، در شکل ۱ نشان داده شده است. بررسی این الگوها با استفاده از نرم افزار مگنتیت (Fe<sub>3</sub>O4: کارت استاندارد شماره ۵۸۰-۹۰۰-۹۰۹ با مگنتیت (Fe<sub>3</sub>O4: کارت استاندارد شماره ۵۸۰-۹۰۰-۹۰۹ با ساختار بلوری fcc و گروه فضایی Fd-3m را برای نمونه سنتز شده با استفاده از عامل قلیایی آمونیوم هیدروکسید تایید میکند. با اینحال، برای نمونه سنتز شده با سدیم هیدروکسید، علاوه بر فاز بلوری مگنتیت (Fe<sub>3</sub>O4)، فاز ثانویه گوتیت (FeOOH). کارت استاندارد شماره ۳۰۷۹–۹۰۰ با ساختار بلوری اورتورومبیک و گروه فضایی Rom) نیز شکل گرفته است. با توجه به تفاوت نمونه FOS بیشتر از نمونه FOA بوده که این فزونی در مقدار نمونه FOS بیشتر از نمونه FOA بوده که این فزونی در مقدار جهت برآورد اندازه بلورکها از رابطه دبای-شر در راستای قله

(۳۱۱) فاز اصلی مگنتیت، استفاده شد. مقادیر برای نمونههای سنتز شده با سدیم هیدروکسید و آمونیوم هیدروکسید به ترتیب برابر با ۱۹ و ۱۰ نانومتر، بدست آمد. علاوه بر این، ثابت شبکه ساختار مکعبی مگنتیت به عنوان فاز بلوری غالب، برای نمونه FOS و FOA به ترتیب برابر ۸/۳۹۹ و ۸/۳۵۸ آنگستروم بدست آمد.



سین ۲۰۱۰ موی پرس پرتو بیدس ناودرات ۲۰۰ او ۲۰۱ م طیف مادون قرمز (FTIR) نمونه ها در شکل ۲، نشان داده شده -است. قله های جذب ظاهر شده در محدوده ۲۰۰ تا ۲۰۰ m مربوط به ارتعاشات کششی یون های آهن در موقعیت های هشت-وجهی و چهاروجهی ساختار اسپینل فریت آهن (مگنتیت) می باشد [۲]. بر این اساس، قله جذب قوی ظاهر شده در محدوده ۲۰۰ m). مربوط به مُد ارتعاش کششی بین یون های آهن و اکسیژن در موقعیت های چهاروجهی بوده، در حالیکه قله های محدوده ۲۰۰ و موقعیت های چهاروجهی بوده، در حالیکه قله های محدوده ۲۰۰ و مشتوجهی نشان می دهد. تفاوت در موقعیت قله های جذبی در این جایگاه ها، به دلیل فاصله پیوندی متفاوت -20-4Fe<sup>2+</sup>/Fe<sup>2+</sup> در فضاهای چندوجهی است.





شناسایی عناصر موجود در نمونه ا و تعیین توزیع فراوانی آنها، با استفاده از آنالیز EDX-MAP بررسی شد. نتایج طیف EDX برای هر دو نمونه و فراوانی عناصر، به عنوان نمونه برای نانوذرات FOA، به ترتیب در شکلهای ٤ و ٥ نشان داده شده است. بر این اساس، تنها عناصر سازنده هر دو نمونه، آهن و اکسیژن است که موید سنتز موفقیت آمیز اکسید آهن میباشد. مطابق نتایج کمی موید سنتز موفقیت آمیز اکسید آهن میباشد. مطابق نتایج کمی FOS و FO2.9404، به ترتیب برابر با Fe2.9404.04 و Fe2.080492 بدست آمد که به فرمول استیکومتری اسمی مگنتیت به ویژه برای نمونه FOA نزدیک میباشد. همچنین تصاویر توزیع عناصر آهن و اکسیژن در نقشه آنالیز عنصری هر دو نمونه، بیانگر توزیع یکنواخت عناصر در سرتاسر نمونههاست.



شکل ٤: طیف EDX نمونههای FOS (بالا) و FOA (پایین)



شکل ٥: توزيع عناصر در نمونه FOA

از طرف دیگر، شدت کلیه قلههای ظاهر شده در طیف FTIR نمونه سنتز شده با آمونیوم هیدروکسید در عدد موج زیر cm<sup>-1</sup> .٦٠٠ نسبت به نمونه سنتز شده با سديم هيدروكسيد، قوىتر مى-باشد، به طوریکه حتی در طیف FTIR نمونه FOS، قله ارتعاشی در محدوده ٤٤٠ cm<sup>-1</sup>، از بین رفته است. ضمناً برای نمونه FOS، دو قله جذب اضافی در عدد موج ۷۹٤ و ۲۰۰ ۳۵۰ ظاهر شده است که موید ارتعاشات خمشی یون <sup>-</sup>OH در ساختار گوتیت می-باشد [۳]. این نتایج در توافق با آنالیز XRD است. شکل و اندازه نانوذرات سنتز شده را میتوان با استفاده از میکروسکوپ الکترونی روبشی (FESEM) مشخص کرد (شکل ۳). همانطور که مشاهده می شود هر دو نمونه از ذراتی با شکل کروی تشکیل شدهاند. میانگین اندازه دانهها برای نمونه FOA و FOS به ترتیب برابر ۲۵ و ۳۸ نانومتر بدست آمد که در توافق با روند مشاهده شده در اندازه بلورکهای بر آورد شده از آنالیز XRD است. ضمناً همانطور که مشاهده می شود استفاده از آمونیوم هیدروکسید به جای سدیم هیدروکسید در سنتز همرسوبی نانوذرات مگنتیت، باعث کاهش اندازه بلورکها می شود. لازم به ذکر است که اختلاف در اندازه ذرات، به دلیل تفاوت در فرآیند هستهسازی و رشد هستهها در هنگام سنتز نمونهها با عوامل قلیایی مختلف میباشد [٤].



شکل ۳: تصاویر FESEM نمونههای FOS و FOA

با اندازه گیری طیف جذب اپتیکی نانوذرات و استفاده از معادله تائوک، مقادیر شکاف اپتیکی (E<sub>g</sub>) مستقیم نانوذرات برآورد شد (شکل ٦). بر این اساس، E<sub>g</sub> نمونههای FOS و FOA به ترتیب برابر مقدار eV ۱/٦٨ و ۲/۰٤ بدست آمد که به اندازه نانوذرات وابسته است.



شکل ۷، منحنی H-H نمونهها در دمای اتاق را نشان می دهد. بر این اساس، مغناطش اشباع نمونههای FOS و FOA به ترتیب برابر با ۱۶ و ۳۸ emu/g می باشد. خاصیت مغناطیسی فاز بلوری گوتیت شناسایی شده در نمونه FOS، پارامغناطیس است [٥]. در نتیجه، کمتر بودن مغناطش اشباع نمونه FOS نسبت به نمونه خالص FOA، قابل توجیه است. از طرف دیگر، مغناطش اشباع هر دو نمونه در مقایسه با نمونه مگنتیت حجمی (۲۹ emu/g)، خیلی کمتر می باشد که به دلیل اندازه بسیار کوچک ذرات سنتز شده است. ضمناً با توجه به حلقه پسماند بسیار باریک در این منحنیها،

می توان نتیجه گرفت که نمونه های تحت بررسی، دارای خاصیت ابریار امغناطیس می باشند.



نتيجه گيرى

در این پژوهش، نانوذرات مگتیت Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> به روش همرسوبی و با دو عامل قلیایی مختلف، تهیه شد. با توجه به آنالیز XRD و FTIR، نمونه سنتز شده با آمونیوم هیدروکسید، تک فاز میباشد. بررسی آنالیز اپتیکی UV-Vis، خاصیت نیمرسانایی نمونهها را تایید میکند. از نظر مغناطیسی، هر دو نمونه به دلیل اندازه کوچک، ابرپارامغناطیس میباشند. با توجه به آنالیزهای مختلف، نمونه سنتز شده با NH4OH، نمونه مناسبتری جهت کاربردهای مختلف از جمله کاربردهای پزشکی میباشد.

مرجعها

- Krishnan, K. M. (2016). Fundamentals and applications of magnetic materials. Oxford University Press.
- [Y] Sivakumar, P., Ramesh, R., Ramanand, A., Ponnusamy, S., & Muthamizhchelvan, C. (2013). Synthesis and characterization of NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> nanoparticles and nanorods. *Journal of Alloys and Compounds*, 563, 6-11.
- [r] Mei, L., Liao, L., Wang, Z., Xu, C. (2015). Interactions between Phosphoric/Tannic Acid and Different Forms of FeOOH. Advances in Materials Science and Engineering, Article ID 250836.
- [1] Abu Yazid, N., and Chin Joon, Y. (2019). Co-precipitation Synthesis of Magnetic Nanoparticles for Efficient Removal of Heavy Metal from Synthetic Wastewater. AIP Conference Proceedings 2124, 020019.
- [o] Blanco-Andujar, C., Ortega, D., Pankhurst, Q.A., Thi Kim Thanh, T. (2012). Elucidating the morphological and structural evolution of iron oxide nanoparticles formed by sodium carbonate in aqueous medium. *Journal of Materials Chemistry*, 22, 12498.





# ذوب نانولولههای گاماگرافاین دوجداره با روش شبیهسازی دینامیک مولکولی

آغاجري ، حامد ' ؛ داودي ، جمال '

ا گروه فیزیک ، دانشگاه زنجان ، زنجان

چکیدہ

در این مطالعه، از بستهی نرمافزاری لمپس برای بررسی فرایند ذوب نانولولههای گاماگرافاینی دوجداره استفاده شده است. پتانسیل بین ذرهای AIREBO را برای بیان بر همکنش های بین اتمهای کربن کربن و همچنین بین لایهها مورد استفاده قرار دادیم. شرایط مرزی دورهای را در سه راستا اعمال و برای به تعادل رساندن ساختار از آنسامبل کانونی NVT در شرایط ایده آل استفاده کردیم. نتایج نشان میدهد که با افزایش دما ابتدا نانولوله داخلی ذوب می شود و پس از آن در دمای بالاتر نانولوله بیرونی شروع به ذوب شدن میکند.

واژه های کلیدی: گرافاین، نانولولهی گاماگرافاین دوجداره، ذوب، شبیه سازی دینامیک مولکولی

Melting of Double Walled  $\gamma$ - graphyne nanotubes using molecular dynamics simulation

#### Aghajari, Hamed<sup>1</sup>; Davoodi, Jamal<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Zanjan University, Zanjan

#### Abstract

In this study, we used the software package LAMMPS for investigating the melting of double walled  $\gamma$ - graphyne nanotubes. The adaptive intermolecular reactive empirical bond order (AIREBO) potential is used to describe the interactions among the carbon atoms and also between layers. Periodic boundary conditions are applied in the three directions. Also, all systems are equilibrated in the canonical ensemble (NVT) at the ambient condition (temperature = 300 °K, pressure = 1 atm and a constant number of particles). The results show that with increasing temperature, the inner nanotube first melts and then the outer nanotube begins to melt at a higher temperature.

*Keywords*: Graphyne, Double Walled  $\gamma$ -graphyne Nanotube, Melt, Molecular Dynamics simulation

PACS No. 81

در گرافاین ششگوشهای گرافین توسط پیوندهای استیلن ( $c \equiv c$ ) به هم متصل شدهاند (شکل ۱). گرافاین نخستین بار در سال ۱۹۸۷ توسط باومن و همکارانش [۳] به عنوان بخشی از تحقیقات بزرگتر دربارهی ویژگیهای شکلهای جدید کربن به صورت پراکنده گزارش شد. گرافاین به خاطر ساختار الکترونیکی کاملا متفاوتش با سایر مواد از جمله مواد مبتنی بر کربن از قبیل الماس و گرافیت اهمیت ویژهای دارد. متداولترین گونه گرافاین، گاما گرافاین است، اگرچه سایر گونهها نیز مطالعه شدهاند. سلول واحد گاما گرافاین از ۱۲ اتم کربن در یک آرایش بسته تشکیل شده است [۳].

#### مقدمه

گرافاین یک ماده دوبعدی و از دگرشکلهای کربن است که ساختاری لانه زنبوری دارد و از نظر حمل بار و رسانندگی الکتریکی بهتر از گرافین است. ساختار آن ورقهای و مسطح به ضخامت یک اتم است و اتمهای کربن آن شامل پیوندهای sp و sp است که در یک شبکه کریستالی چیده شدهاند. این حدس زده می شود که وجود گرافاین به قبل از سال ۱۹٦۰ میلادی برگردد و پس از کشف فولرین توجهها را به خود جلب کرده باشد. محققین از سال ۱۹۸۰ مشغول مطالعه گرافاین هستند [۱،۲].





شکل ( : (a) ألفا گرافاین، (b) بتا گرافاین، (c) گاما گرافاین

در کنار کارهای آزمایشگاهی، مطالعات نظری هم روی خواص گرافاین انجام شده است. با استفاده از محاسبات، کانگ و همکارانش خواص کشسانی، الکتریکی و اپتیکی گاماگرافاین را بررسی کردهاند، که میتواند به عنوان گرافین با جایگزین شدن یک سوم پیوندهای کربن-کربن با پیوندهای استیلن عنوان شود. آنها به این نتیجه رسیدند که گاماگرافاین خیلی نرمتر از گرافین است و خواص اپتیکی بی نظیری دارد [٤].

نانولولهی کربنی تک جداره میتواند با رول کردن ورقهی گرافین تولید شود، به طریق مشابه میتوانیم لولههایی را تصور کنیم که از طریق رول کردن ورقههای گرافاین بدست میآیند. شکل ۲ این ایده را با یک مثال از نانولولهی گرافاین نوع زیگزاگ که از طریق رول کردن ورقهی مشخصی از گرافاین تولید شده را نشان میدهد [۲].



شکل۲ : رابطهی ساختاری بین ورقههای کربن و نانولولهی کربنی تک جداره از (a) گرافین و (b) گاماگرافاین

همچنین نانولولههای چند دیواره از چند لایه ی استوانهای شکل تو درتو و متحدالمرکز تشکیل میشوند. تاکنون خواص مختلفی نظیر خواص مکانیکی[٥]، گرمایی [٦] و الکتریکی[۷] برای نانولولههای

گاماگرافاین تکجداره انجام شده است اما تابحال نانولولههای گاماگرافاین دوجداره مورد بررسی قرار نگرفتهاند. نانولولههای گاماگرافاین دوجداره همانند نانولولههای کربنی دوجداره، از قرار گرفتن دو لایه ی استوانهای شکل تو در تو و متحدالمرکز که در فاصلهی ثابتی از هم قرار گرفته اند (شکل۳) تشکیل می شوند.



شکل۳ : نانولولهی گاماگرافاین دوجداره که فاصلهی لایههای تو در تو Å ۳,۳۲ میباشد.

## روش شبيهسازى

در این پژوهش با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی به مطالعهی ذوب نانولولهی گاماگرافاینی دوجداره می پردازیم. تمامی شبیه سازیهای انجام شده در این پروژه با استفاده از بستهی نرم-افزاری LAMMPS انجام گرفته است. برای توصیف برهمکنش-های بین اتمهای کربن و بین لایهای درنانولولههای گاماگرافاینی دوجداره از پتانسیل برهمکنشی AIREBO استفاده شده است. از الگوریتم سرعت ورله برای حل معادلات حرکت استفاده کردهایم. شرایط مرزی دورهای را در جهت طول نانولوله به منظور حذف اثرات اتمهای آزاد در لبهها اعمال کردیم. تمامی شبیه سازیها برای محاسبهی ذوب نانولولهی گاما گرافاینی دوجداره در دمای اتاق محاسبهی ذوب نانولولهی گاما گرافاینی دوجداره در دمای اتاق

ابتدا ساختار نانولوله دوجداره گاماگرافاین با استفاده از طول


پارامترهای موجود در منابع معتبر درون جعبه شبیه سازی چیده شده است. سپس معادلات حرکت با گام زمانی کوچک ۱/۰ فمتوثانیه اعمال شدند. قبل از ذوب، ساختار بوسیلهی باروستات و ترموستات نوز-هوور هنگرد NPT با گذشت ۱۰۰ پیکوثانیه به تعادل اولیه رسید.



شکل٤ : نانولولهی گاماگرافاین دوجداره در شکلهای ٥ و ٦ و ۷ نمودارهای تعادل ساختار نانولوله گاماگرافاین دوجداره را مشاهده میکنیم. در این نمودارها انرژی، فشار و حجم ساختار بر حسب زمان رسم شدهاند. میبینیم که با گذشت زمان این کمیتهای فیزیکی حول یک مقدار خاص افت و خیز دارند که بیانگر به تعادل رسیدن ساختار است.



شکل ٥ : تغییرات انرژی کل ساختار با گذشت زمان در فرایند تعادل



شکل ٦ : تغییرات فشار سیستم با گذشت زمان در فرایند تعادل



شکل۷: تغییرات حجم سیستم با گذشت زمان در فرایند تعادل

پس از تعادل دمای نانولوله را با آهنگ K افزایش دادیم تا نانولوله ذوب شود. نمودارهای ۸ و ۹ و ۱۰ نیز فرایند ذوب را در سیستم نشان میدهند. نمودارهای انرژی، فشار و میانگین مربع جابه-جایی اتمهای نانولولهی گاماگرافاینی دوجداره را بر حسب دما برای بررسی فرایند ذوب رسم نمودهایم. تغییرات ناگهانی در نمودارهای ذوب و میانگین مربع جابهجایی بیانگر ذوب ساختار است. با بررسی شکلهای ۸، ۹ و ۱۰ مشاهده میکنیم که در دمایی حدود K و X ۲۰۰۰ نمودارهای انرژی و میانگین مربع جابهجایی دچار تغییر ناگهانی میشوند که به ترتیب بیانگر دمای ذوب نانولوله داخلی و نانولوله خارجی هستند.





# نتيجه گيرى

در این پژوهش به بررسی ذوب نانولولهی گاماگرافاینی دوجداره به روش شبیهسازی دینامیک مولکولی پرداختیم. مشاهده شد که در ابتدا نانولوله داخلی ذوب میشود سپس با افزایش دما نانولوله بیرونی نیز شروع به ذوب شدن میکند. در دمایی حدود ۲۰۰۴ نانولوله داخلی و در دمایی حدود ۲ ٤٥٠٠ نانولوله بیرونی شروع به ذوب شدن میکنند.

# مراجع

- Malko, Daniel, Christian Neiss, Francesc Vines, and Andreas Görling.
   "Competition for graphene: graphynes with direction-dependent dirac cones." *Physical review letters* 108, no. 8 (2012): 086804.
- [Y] Coluci, V. R., S. F. Braga, S. B. Legoas, D. S. Galvao, and R. H. Baughman. "Families of carbon nanotubes: Graphyne-based nanotubes." *Physical Review B* 68, no. 3 (2003): 035430.
- [٣] Baughman, R. H., H. Eckhardt, and M. Kertesz. "Structure-property predictions for new planar forms of carbon: Layered phases containing sp 2 and sp atoms." *The Journal of chemical physics* 87, no. 11 (1987): 6687-6699.
- [٤] Kang, Jun, Jingbo Li, Fengmin Wu, Shu-Shen Li, and Jian-Bai Xia. "Elastic, electronic, and optical properties of two-dimensional graphyne sheet." *The Journal of Physical Chemistry C* 115, no. 42 (2011): 20466-20470.
- [°] Li, M., et al., Mechanical properties of γ-graphyne nanotubes. RSC advances, 2018. 8(28): p. 15659-15666.
- [7] Hu, M., Y. Jing, and X. Zhang, Low thermal conductivity of graphyne nanotubes from molecular dynamics study. *Physical Review B*, 2015. 91(15): p. 155408.
- [Y] Kang, B., J.H. Moon, and J.Y. Lee, Size dependent electronic band structures of β-and γ-graphyne nanotubes. *RSC Advances*, 2015. 5(98): p. 80118-801.



شکل ۱۰: نمودار میانگین مربع جابهجایی اتمها بر حسب دما در فرایند ذوب





اثر تابش بر روی خواص ترموالکتریکی نانو نوارهای سیلیسن لبه دسته مبلی اردیانی ، مبینا ؛ کتابی ، سید احمد ؛ کلامی، رضا دانشکاه فیزیک دانشگاه دامغان، دامغان، ایران

### چکیدہ

در این مطالعه، با استفاده ار مدل تنگ بست و فرمولبندی تابع گرین غیر تعادلی، خواص ترموالکتریکی نانو نوازهای سیلیسن لبه دسته مبلی که تحت تابش یک میدان الکترومغناطیسی در زوایای مختلف قرار گرفته است بررسی می شود. خواص ترموالکتریکی مثل مشخصه جریان-دما، ضریب سیبک و بهره ترموالکتریکی در نانو نوازهای مذکور مورد مطالعه قرار می گیرند. نتایج حاکی از آن است که تابش میدان الکترومغناطیسی باعث افزایش جریان و خصوصیات ترموالکتریکی نانو نواز سیلیسن لبه دسته مبلی خواهد شد. همچنین در تابش با زاویه مایل ۴۵ درجه بیشترین مقدار جریان، ضریب سیبک و بهره ترموالکتریکی نانو نواز شاهد خواهیم بود.

واژه های کلیدی: سیلیسن، تابش میدان الکترومغناطیسی، بهره ترموالکتریکی

### Effect of radiation on the thermoelectric properties of armchair silicene nanoribbons

#### Ardyani, Mobina; Ketabi, Seyed Ahmad ; Kalami, Reza

School of Physics, Damghan University, Damghan, Iran

#### Abstract

In this study, by using the tight-binding model and non-equilibrium Green's function formalism, the thermoelectric properties of armchair silicene nanoribbons, which is exposed to electromagnetic field at different angles, are investigated. Thermoelectric properties such as current-temperature characteristic, Seebeck coefficient and Figure of merit are studied. The results indicate that the radiation of the electromagnetic field will increase the current and thermoelectric properties of the armchair silicene nanoribbon. Also, radiation at an angle of 45 degrees has the most value of current, Seebeck coefficient and Figure of merit.

*Keywords:* Silicene, Electromagnetic field radiation, Figure of merit PACS No. 72

پدیدهای موجی است که در فضا منتشر می شود و از میدانهای الکتریکی و مغناطیسی ساخته شده است. این میدانها در حال انتشار، بر یکدیگر و بر جهت پیشروی موج عمود هستند [۳]. تابش الکترومغناطیسی در مواد مختلف، باعث ایجاد پراکندگی در سامانه شده و در نتیجه می تواند بازده ترموالکتریکی را به میزان قابل توجهی افزایش می دهد [۴]. در این مطالعه قصد داریم با اعمال میدان الکترومغناطیسی، تغییرات خواص ترموالکتریکی را در نانو نوار سیلیسن لبه دسته مبلی مشاهده کنیم. در این کار، ما از ترکیبی از روش تابع گرین غیرتعادلی (NEGF) و مدل تنگ بست استفاده می کنیم.

مقدمه

سیلیسن دو بعدی به دلیل خواص الکترونی و ترموالکتریکی منحصر به فرد خود، توجه زیادی را به خود جلب کرده است. سیلیسن بسیاری از ویژگیهای گرافن را در بردارد، اما برخلاف گرافن دارای ساختار چین خورده و اثر اسپین مدار ذاتی می-باشد[1]. بازده یک دستگاه ترموالکتریکی معمولا با کمیتی به نام بهره ترموالکتریکی مشخص می شود. ماده ترموالکتریک ایده آل دارای ضریب سیبک و رسانندگی الکتریکی بالا و همچنین رسانندگی گرمایی پایین می باشد[۲] .تابش الکترومغناطیسی





شکل ۱ : (الف) طرحی از نانو نوار سیلیسن لبه دسته مبلی در صفحه x-y و (ب) نانو نوار سیلیسن لبه دسته مبلی که تحت تابش الکترومغناطیس در محور z قرار گرفته است

#### مدل و روش محاسبه

شکل ۱ ساختارهای نانو نوار سیلیسن لبه دسته مبلی با عـرض N=5 را نشان میدهد که تحت تابش الکترومغناطیسی قرار گرفتـه است.

ماتریس هامیلتونی سامانه با در نظر گرفتن تقریب نزدیکترین همسایهها و با استفاده از مدل تنگ بست به صورت زیر نوشته میشود:

$$H = \varepsilon_{0} \sum_{i\alpha} c_{i\alpha}^{\dagger} c_{i\alpha} + t \sum_{\langle i,j \rangle \alpha} c_{i\alpha}^{\dagger} c_{i\alpha} + i \frac{\lambda_{SO}}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle \langle i,j \rangle \rangle \alpha\beta} v_{ij} c_{i\alpha}^{\dagger} \sigma_{\alpha\beta}^{z} c_{j\beta} - i \frac{2}{3} \lambda_{Ra} \sum_{\langle \langle i,j \rangle \rangle \alpha\beta} \mu_{ij} c_{i\alpha}^{\dagger} (\vec{\sigma} \times \vec{d}_{ij}^{0})_{\alpha\beta}^{z} c_{j\beta}$$
(1)

که جمله اول انرژی جایگاهی را نشان میدهد. جمله دوم برهمکنش همسایه اول در شبکه شانه عسلی سیلیسن را توصیف میکند که در آن t = -1.6ev میباشد. جمله سوم و چهارم برهمکنش اتمها با دومین همسایه نزدیک را نشان داده و به ترتیب بیانگر برهمکنش اسپین مدار ذاتی با  $\lambda_{SO} = 3.9mev$  و راشبا با قدرت  $\lambda_{SO} = 3.9mev$  هستند.  $\langle i, j \rangle$  جمع روی همسایه-با قدرت  $\lambda_{Ra} = 0.7mev$  می مسایه مای دوم و  $\alpha$  و جالت اسپین هستند.. iv و ij معمولا  $1\pm$  میباشد. حالت اسپین هستند.. و iv و اساس فرمولبندی لانداور – بوتیکر به صورت زیر خواهد شد:

$$I = \frac{2e}{h} \int T(E) [f_L(E) - f_R(E)] dE$$
<sup>(Y)</sup>

خواص ترموالکتریکی شامل رسانندگی الکتریکی و رسانندگی گرمایی الکترونی، ضریب سیبک و بهره ترموالکتریکی به ترتیب از طریق روابط زیر محاسبه میشوند:

$$G = e^{2}L_{0}$$
(°)  
$$k_{e} = \frac{1}{T}(L_{2} - \frac{L_{1}^{2}}{L})$$
(°)

$$S = -\frac{1}{eT_0} \frac{L_0}{L_0}$$
(a)

$$ZT_e = \frac{|G|S^2T}{k} \tag{(5)}$$

که در آنها ضریب ترابری L به صورت زیر تعریف میشود:

$$L_{n} = \frac{1}{h} \int T(E) (E - \mu)^{n} \left[ -\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right]_{\mu,T} dE \qquad (\forall)$$

در ادامه میخواهیم تأثیر تابش الکترومغناطیس به صورت قطبش S را بر روی خواص الکترونی و ترموالکتریکی نانو نوارهای سیلیسن لبه دسته مبلی را بیابیم. نمودار مربوط به میدان الکتریکی را در صفحه X-Y رسم میکنیم.



شکل ۲: طرحی از انتشار میدان الکتریکی در صفحه X-Y

$$\vec{K} = -Ksin\theta cos\phi\hat{\imath} - Ksin\theta sin\phi\hat{\jmath} - Kcos\theta\hat{k}$$
 (A)

$$\vec{E_0} = -E_0 \sin\varphi \hat{\imath} + E_0 \cos\varphi \hat{\jmath} \tag{9}$$

$$\overrightarrow{B_0} = B_0 \cos\theta \cos\varphi \hat{\imath} + B_0 \cos\theta \sin\varphi \hat{\jmath} - B_0 \sin\theta \hat{k} \quad (1 \cdot)$$

و به همین صورت پتانسیل برداری به صورت زیر نوشته میشود:

$$\overrightarrow{A_0} = -A_0 sin\varphi \hat{\imath} + A_0 cos\varphi \hat{\jmath} \tag{11}$$

ڎٳؿڲٳڋ بيهييي

که در حالت قطبش S همانطور که از معادله ۱۱ پیداست مقدار  $A_{0z}$  برابر با صفر میباشد. همچنین ادامه محاسبات را در با فرض  $\phi = 0$  ادامه میدهیم.. پس با توجه به این فرضیات رابطه نهایی پتانسیل برداری در قطبش S به صورت زیر درخواهد آمد:

$$\vec{A} = A_0 \cos(-K \sin\theta x - K \cos\theta z) \hat{j} \tag{11}$$

به طور کلی پارامتر پرش در حضور تابش موج الکترومغناطیسی وابسته به زمان برای دو اتم کنار هم (تقریب نزدیکترین همسایه) به صورت زیر نوشته میشود:

$$t_{n,n+1} = t_0 \exp\{i\frac{e}{\hbar c}\int_{r_n}^{r_{n+1}}\vec{A}.\,d\vec{r}\}\tag{17}$$

که در اینجا  $t_0$  پارامتر پرش اولیه می باشد.

وقتی موج فرودی الکترومغناطیسی را کلاسیکی در نظر بگیریم،  
انرژی در یک حجم 
$$\Omega$$
 به صورت زیر نوشته خواهد شد:

$$E = \frac{\omega^2}{2\pi c^2} \Omega(A_0)^2 = N_{ph} \hbar \omega \tag{14}$$

پس می توان  $A_0$  را به صورت زیر بدست آورد:

$$A_0 = \left(\frac{2\pi\hbar c^2 N_{ph}}{\omega\Omega}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{10}$$

که در این رابطه  $\frac{N_{ph}}{\Omega}$  تعداد فوتونها در واحد حجم در واحد زمان میباشد. اگر دامنه نوسانات را کوچک در نظر بگیریم این کمیت را میتوان برابر ۱ در نظر گرفت. همچنین  $0.01\omega_0 = 0$  فرکانس موج فرودی میباشد که  $w_0 = 4.13 \times 10^{16} Hz$  واحد فرکانس در مختصات اتمی میباشد.

# نتايج و بحث

همانطور که در روابط قسمت قبل نوشته شد تابش موج الکترومغناطیس به نانو نوار، باعث تغییر در پارامتر پرش و در نتیجه در هامیلتونی سامانه خواهد شد. تغییر در هامیلتونی سامانه باعث تغییر در جریان عبئری از نانو نوار مذکور میشود. فرض میشود تابش تحت زوایای ۰، ۳۰، ۴۵، ۶۰ و ۸۵ درجه نسبت به محور Z به نانو نوار اعمال شده است. فرض شده است که دمای

الکترود سمت راست در  $T_R = 0K$  و دمای الکترود سمت چپ تا  $T_L = 300K$  تغییر میکند. ضمنا  $\mu_R = \mu_L = 0ev$  در نظر گرفته شده است. ابتدا جریان به وجود آمده در نانو نوار را به صورت تابعی از دمای الکترود سمت چپ رسم میکنیم.



شکل ۳: جریان بر حسب دمای الکترود سمت چپ در نانو نوار سیلیسن لبه دسته مبلی با عرض N=5 در حالت بدون تابش و در حالتی که موج الکترومغناطیس تحت زوایای ۰، ۸۰، ۴۵ ، ۶۹ و ۸۵ درجه به نانو نوار تابیده شده است.

همانطور که در شکل ملاحظه می شود، با افزایش دمای الکترود سمت چپ جریان در سامانه افزایش می یابد. وقتی موج الکترومغناطیس به سامانه تابیده می شود جریان مقدار بیشتری به خود می گیرد و در زاویه 45= $\theta$  ، جریان به حداکثر مقدار خود می رسد. جریان در سامانه وقتی موج با زاویه 45= $\theta$  تابیده می شود حدود ۸ برابر بیشتر از وقتی است که موج با زاویه  $0=\theta$  به سامانه برخورد می کند.

اگر دمای سامانه را روی T = 300 K ثابت نگه داریم، می توانیم کمیتهای ترموالکتریکی ضریب سیبک، رسانندگی الکتریکی، رسانندگی گرمایی الکترونی و بهره ترموالکتریکی را به صورت تابعی از پتانسیل شیمیایی سامانه رسم کنیم.



شکل ۴: ضریب سیبک بر حسب پتانسیل شیمیایی در نانو نوار سیلیسن لبه دسته مبلی با عرض N=5 در حالت بدون تابش و در حالتی که موج الکترومغناطیس تحت زوایای ۰، ۸۵. ۴۵ ، ۶۰ و ۸۵ درجه به نانو نوار تابیده شده است.

کانشکان پیچینی



شکل ۶: بهره ترموالکتریکی بر حسب پتانسیل شیمیایی در نانو نوار سیلیسن لبه دسته مبلی با عرض N=5 در حالت بدون تابش در حالتی که موج الکترومغناطیس تحت زوایای ۰، ۳۰، ۴۵، ۶۰ و ۸۵ درجه به نانو نوار تابیده شده است.

در نمودار بهره ترموالکتریکی مشاهده میشود بیشترین مقدار مربوط به بهره ترموالکتریکی در بین این شش نوع از نانو نوارها، مربوط به نانو نوار سیلیسن لبه دسته مبلی است که موج الکترومغناطیس با زاویه 45 = 6 به آن تابیده شده است.

## نتيجه گيرى

خواص ترمو الکتریکی نانو نوار سیلسن لبه دسته مبلی با عرض N=5 به طور کامل مورد مطالعه قرار گرفت. با محاسبه خواص ترموالکتریکی نانو نوارهای سیلیسن لبه دسته مبلی به این نتیجه مهم رسیدیم که تابش موج الکترومغناطیس باعث بهبود خواص ترموالکریکی در نانو نوار خواهد شد. به نظر میرسد اعمال موج الکترومغناطیس به ساختارهای دوبعدی باعث خواهد شد خاصیت ترموالکتریکی این نوع مواد بهبود یابد. همچنین ذکر این نکته ضروری است که تابش موج با زاویه 45 =  $\theta$  بیشترین بهره ترموالکتریکی را به خود اختصاص داده است و این یعنی با تابش موج الکترومغناطیس با زاویه مایل به صورت 45 =  $\theta$  می-نواند خاصیت ترموالکتریکی این نوع ساختارهای دوبعدی را بهبود تواند خاصیت ترموالکتریکی این نوع مایل به صورت 45

مرجعها

[1]CC. Liu, W. Feng and Y. Yao, "Quantum Spin Hall Effect in Silicene and Two-Dimensional Germanium," *Phys. Rev. Lett.* **107**, No. 7 (2011) 076802.

[2]Y. M. Zuev, W. Chang and P. Kim, "Thermoelectric and magnetothermoelectric transport measurements of graphene," *Phy. Rev. let.* **102** No. 9 (2009) 096807.

[<sup>\*</sup>] M. Kerker, "The scattering of light and other electromagnetic radiation. Elsevier" (2016)

[\*] H. Lv, Z. Yang, B. Liu, G. Wu, Z. Lou, B. Fei, and R. Wu, "A flexible electromagnetic wave-electricity harvester" *Nature communications*, **12**, No. 1 (2021) 1-8.

شکل ۴ نمودار ضریب سیبک بر حسب پتانسیل شیمیایی را در شش نوع نانو نوار مذکور نشان میدهد. در همه منحنیها در پتانسیل شیمیایی صفر، ضریب سیبک هم برابر صفر میباشد. ضریب سیبک در پتانسیل شیمیایی Δ3eV±=μ یک قله دارد. نکته مهم در خصوص ضریب سیبک نانو نوارها این است که نانو نوارهای سیلیسن که موج الکترومغناطس با زاویه 45=θ به آن تابیده شده است به مراتب ضریب سیبک بیشتری نسبت به زوایای دیگر و همچنین نانو نوار سیلیسن ساده دارند.



شکل ۵: (الف) رسانندگی الکتریکی و (ب) رسانندگی گرمایی الکترونی بر حسب پتانسیل شیمیایی در نانو نوار سیلیسن لبه دسته مبلی با عرض 5=N در حالت بدون تابش و در حالتی که موج الکترومغناطیس تحت زوایای ۰۰ ۳۰، ۲۵، ۶۰ و ۸۵ درجه به نانو نوار تابیده شده است.

شکل ۵ نمودار رسانندگی الکتریکی و رسانندگی گرمایی الکترونی را برحسب پتانسیل شیمیایی در نانو نوارهای مذکور نشان می دهد که رفتار این نمودارها بسیار شبیه به هم می باشند. همانطور که در شکل مشخص است کمترین مقدار رسانندگی الکتریکی و رسانندگی گرمایی الکترونی مربوط به نانو نوار سیلیسن می باشد که موج الکترومغناطیس با زاویه تابش 45=θ به آن برخورد کرده است. همچنین در 0=θ بیشترین مقدار رسانندگی الکتریکی و رسانندگی گرمایی الکترونی را شاهد هستیم.





# بررسی اثر شرایط آزمایشگاهی بر ویژگیهای ساختاری و مغناطیسی نانوساختارهای سولفید آهن تهیه شده به روش الکتروکریستالیزاسیون

فرزین صدر، سحر'؛ موسیوند، صبا ۱۰۰؛

<sup>2, ال</sup>گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه لرستان، خرم آباد، لرستان، ایران

\*Mosivand.S@lu.ac.ir

چکيده

در این مقاله، نانوذرات سولفید آهن در یک سلول الکتروشیمیایی حاوی دو ورقه آهن به عنوان الکترودهای کاتد و آند درون محلول الکترولیت ساخته شدند. به منظور بررسی اثر ولتاژ بر خواص ساختاری نانوذرات سولفید آهن چندین نمونه با اعمال ولتاژهای مختلف از<sup>۵</sup> تا۲۵ ولت ساخته و نمونهها در دمای ۲۰۰ درجه سانتیگراد در آون حرارت دیدند. ذرات تولید شده با استفاده از دستگاه های VSM، XRD و میکروسکوپ الکترونی روبشی SEM مشخصهیابی شدند و الگوی XRD تشکیل فازهای سولفید آهن را در دمای ۲۰۰ درجه سانتی گراد تایید کرد و هیچ پیک ناخالصی وجود نداشت. تصاویر SEM نشان دادند که ذرات به صورت نانوذرات کروی هستند و نتایج VSM فرومغناطیسی بودن نانوذرات را تایید کرد.

واژه های کلیدی: سلول الکتروشیمیایی، سولفید آهن، نانومواد، مغناطیس

# The effect of experimental conditions on structural and magnetic properties of iron sulfide nanostructures prepared by electrocrystallization

Farzinsadr, sahar<sup>1</sup>; saba, Mosivand<sup>1</sup>;

<sup>1</sup>Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Lorestan University, Khorram Abad, Lorestan, Iran

#### Abstract

In this article, iron sulfide nanoparticles were fabricated in an electrochemical cell containing two iron sheets as electrodes in an electrolyte solution. In order to determine the effect of voltage on the structural properties of sulfide nanoparticles, different samples were synthesized by applying different voltages from 5 to 25 voltages and the samples were heated at 200 °C in an oven. The produced particles were characterized using XRD, VSM and SEM. The XRD patterns confirmed the formation of iron sulfide structure at 200 °C. The SEM images showed the nanoparticles with different sizes and the VSM results confirmed that the nanoparticles are magnetically soft.

Keywords: Electrochemical cell, Iron sulfide, Nanomaterial, Magnetization.

PACS No. 61



#### مقدمه

سولفیدآهن یکی از نانوساختارهای فلزی است که از لحاظ نوع ساختار و خواص فیزیکی و شیمیایی خاص، بررسی سیستماتیک روی آن متمرکز است. سولفیدهای آهن انواع مختلفی دارند که شامل ترکیبات حاوی آهن و گوگرد است و فرمول FexSy دارند. شکل بلوری، فاز، خواص فیزیکی و شیمیایی سولفیدهای آهن به میزان محتوای آهن درون آن بستگی دارد و تغییر می کند [۱]. ساختارهای بلوری سولفید-آهن دارای ساختار لایهای چهارضلعی است که در آن اتمهای آهن از طریق هماهنگی چهار وجهی به چهار اتم گوگرد با فاصله مساوی متصل میشوند. یک اتم آهن منفرد با چهار اتم گوگرد با فاصله-Fe Fe 2.5967 Å مساوى هماهنگ مىشود. سولفيدهاى آهن در اندازه نانو فعالیت آنزیمی مانندی از خود نشان میدهند که پتانسیل قابل توجهی برای بهبود سلامت و کیفیت زندگی انسان دارند. در سالهای اخير توليد نانوساختارها مختص به بخش آزمايشگاهي نبوده و هدف از ساخت، کاربرد آنها درشاخههای مختلف اعم از زیست محیطی، علمي و صنعتي است و از آنجا كه نانوساختارهاي توليدي در صورت داشتن شکل و ویژگیهای ساختاری یکسان، اندازه یکنواخت، ویژگی-های فیزیکی و شیمیایی مشخص و کنترل شده، قابلیت کاربردی پیدا میکنند و باید از روشی استفاده کنیم که این امکان را فراهم آورد. ساخت نانومواد سولفيدفلزي قبلا به روش هاي بيشماري از جمله تزریق داغ، ترمولیز پیش سازه تک منبع، راههای هیدروترمال و حلول گرمایی برای تولید نانومواد بررسی شدهاند. از میان روشهای متعدد ارائه شده برای ساخت این نانوساختارها، روش الکتروکریستالیزاسیون را انتخاب ميكنيم. روش الكتروكريستاليزاسيون

روشی کاملا ساده است که نیاز به تجهیزات پیچیده ندارد و با کنترل مناسب اندازه ذرات، خواص مختلف ساختاری، فیزیکی و شیمیایی را فراهم میکند. از جمله این مزیتها میتوان به سرعت بالا، مقرون به صرفه بودن، تمیزی سازوکار اشاره کرد. نانوبلورهای مواد سولفیدفلزی به دلیل انتخاب فراوان مواد با ویژگیهای الکترونیکی، نوری، فیزیکی و شیمیایی به راحتی قابل تنظیم هستند و با محدود

کردن ابعاد برای کاربردهای انرژیهای تجدیدپذیر توجه زیادی را به خود جلب کردهاند، از جمله کاربردهای سولفیدآهن در دستگاههای مختلف مانند سلولهای خورشیدی، دیودهای ساطعکننده نور، حسگرها، دستگاههای ترموالکتریک، باتریهای یونی، سلولهای سوختی و دستگاههای حافظه غیرفرار و غیره... است. همچنین سولفیدهایفلزی به دلیل خواص ضدباکتریایی در تصویربرداری و تشخیص درمانهایی مثل نوردرمانی و شیمیدرمانی در تومورها و سلول های سرطانی، داروسازی و ساخت حسگرهای زیستی، کاربردهای بالقوهای در پزشکی دارند [۲–۲].

## مواد و روشها

ساخت نمونه ها به روش الکتروکریستالیزاسیون در سلول الکتروشیمیایی نیازمند دو الکترود از جنس آهن با خلوص بالا که به عنوان آند و کاتد در محلول ۰/۱ مولار سولفیدسدیم است. ولتاژهای مستقیم و ثابت ۲۰/۱۰/۱۰/۱۰/ ولت در شرایط مشابه هرکدام در مدت ۳۰ دقیقه به سیستم اعمال شدند. پس از اعمال ولتاژ مناسب به سلول، در سطح آند واکنش های اکسیدی انجام می شود و سدیم موجود در محلول الکترولیت با آند واکنش می دهد و سطح آند خورده می شود و به صورت رسوب از سطح آند جدا و تهنشین می شود.

 $Na_2 S. 9H_2O \rightarrow [HS^-]. [Na^+]. [Na^+]$ 

Fe<sup>2+</sup> + HS<sup>-</sup> = FeS + H<sup>+</sup> در نهایت پس از قطع جریان رسوب تهنشین شده با استفاده از آهنربا جدا شده و با استون چندین بار شستشو داده می شود، سپس در آون دمای ۲۰۰ درجه سانتی گراد به مدت یک ساعت خشک می شود تا برای مشخصهیابی ساختاری و مغناطیسی توسط XRD، XRD و SEM آماده شوند.





به منظور اطلاع دقیق از ساختار و تصویربرداری از مورفولوژی سطح نمونهها از دستگاه SEM استفاده شد که رایج ترین روش برای ارزیابی ریزساختار، اندازه و پراکندگی مواد را نشان می دهد. SEM نمونهها در شکل (۱) نشانگر این است که نانوذرات سولفید آهن به صورت نانو صفحات، نانوذرات کروی و اشکال گل مانند گزارش شده است. در جدول ۱ اندازه توده نانوذرات بر حسب ولتاژ ارائه شده است. به منظور دستیابی به اطلاعات دقیق تر از عناصر موجود در نمونههای ساخته شده از طیف سنج پراش انرژی پرتو ایکس (EDX) استفاده شد. تحلیل SEM یک افزونه در دستگاههای SEM جهت تشخیص نوع عنصر و درصد وزنی یا اتمی آن ها در نمونه جامد است.



شکل (۱) تصاویر SEM در ولتاژهای مختلف.

شکل (۲) نتیجه حاصل از تحلیل EDX نمونه ساخته شده است که نتایج حضور عناصر آهن، سدیم، اکسیژن و سولفید را تایید میکند که Fe مربوط به ساختار آند است. S و Na متعلق به Na<sub>2</sub>S به کار رفته در محلول الکترولیت میباشند.



شکل (۲) نتایج حاصل از EDX نمونه ساخته شده در ولتاژ ۷ ۲۵.

ولتاژ(v)	اندازه توده
	نانوذرات(nm)
5	110
10	125
15	120
20	100
25	250

جدول (۱) اندازه توده نانوذرات برحسب ولتاژ.

ماهیت ساختار بلوری نانوسولفید آهن تولید شده با استفاده از دستگاه XRD مورد مطالعه قرار گرفت. شکل (۳) الگوهای پراش نمونههای تولید شده در ولتاژهای ۲۰/۱۵/۱۰/۵ ولت را نشان میدهد. مقایسه این الگو با الگوی موجود در کارت(089-JCPDS) [۴] نشان میدهد که این ماده دارای ساختار بلوری سولفیدآهن

با فرمول شیمیایی (FeS2) میباشد. در نتایج حاصل XRD همانطور که در شکل (۳) دیده می شود، هیچ قله آشکاری از اکسید آهن ظاهر نشده و فقط قلههای مربوط به سولفیدآهن دیده می شوند. با افزایش ولتاژ نانوسولفیدآهن بیشتری تولید می شود ولی در ولتاژهای پایین واکنش به کندی انجام شد و دمای محلول کمتر در نتیجه مقدار نانو ذرههای تولید شده کمتر است.



شکل (۳) الگوی پراش اشعه ایکس مربوط به نمونه های ساخته شده در ولتاژهای



به منظور بررسی خواص مغناطیسی نانوسولفید آهن تولید شده از دستگاه VSM استفاده گردید. همانطور که در شکل (٤) مشاهده می-شود ساختار فرومغناطیس و دارای مغناطیس نرم است.مغناطش اشباع

و میدان وادارندگی برای ولتاژهای ۲۰/۱۰/۱۰/۵ رلت به ترتیب برابر است با ۲، ۱۱، ۹، ۲ و ۹۰ emu/g و ۱۰۰، ۵۰، ۵۰، ۱۰۰، ۵۰ OO است.نانو سولفیدآهن ساخته شده در ولتاژ <sup>۵</sup> ولت Ms کمتری نسبت به بقیه نشان داده است که میتواند به کم بودن میزان نانوذرات مغناطیسی سولفیدآهن ارتباط داده شود و نمونه با ولتاژ ۱۰ بیشترین مغناطش را دارد. نتایج به دست آمده با نتایج مقاله [۴] در توافق است.

نتيجه گيري

در این مقاله نانوذرات سولفیدآهن به روش الکتروکریستالیزاسیون با اعمال ولتاژهای مختلف در شرایط یکسان ساخته شد و عملیات حرارتدهی نمونهها در دمای ۲۰۰ درجه سانتی گراد درون آون انجام شد. سپس نانوذرات تولید شده با دستگاههای SEM ، RD و VSN مورد بررسی ساختاری و مغناطیسی قرار گرفتند. الگوی XRD حاکی از تشکیل نانوسولفید آهن است. تصاویر SEM نشان دادند که نانو سولفیدآهن دارای مورفولوژی سطحی یکنواخت و ساختار کروی می-باشد و VSM مغناطیسی بودن نانوذرات را تایید کرد.

منابع

[1] Qian, X. F., Zhang, X. M., Wang, C., Xie, Y., Wang, W. Z., & Qian, Y. T. (1999). *The preparation and phase transition of nanocrystalline iron sulfides via toluene-thermal process. Materials Science and Engineering: B*, 64(3), 170-173.

[2] Lai, C. H., Lu, M. Y., & Chen, L. J. (2012). Metal sulfide nanostructures: synthesis, properties and applications in energy conversion and storage. *Journal of Materials Chemistry*, **22**(1), **19-30**.

[3] Chandrasekaran, S., Yao, L., Deng, L., Bowen, C., Zhang, Y., Chen, S., ... & Zhang, P. (2019). Recent advances in metal sulfides: from controlled fabrication to electrocatalytic, photocatalytic and photoelectrochemical water splitting and beyond. *Chemical Society Reviews*, **48**(**15**), **4178-4280**.

[4] Yuan, Y., Wang, L., & Gao, L. (2020). Nano-Sized Iron Sulfide: Structure, Synthesis, Properties, and Biomedical Applications. Frontiers in Chemistry, **8**, **818**.

[5] Argueta-Figueroa, L., Martinez-Alvarez, O., Santos-Cruz, J., Garcia-Contreras, R., Acosta-Torres, L. S., De la Fuente-Hernandez, J., & Arenas-Arrocena, M. C. (2017). Nanomaterials made of non-toxic metallic sulfides: A systematic review of their potential biomedical applications. *Materials Science and Engineering*: C, **76**, **1305-1315**.

[6] Wadia, C., Alivisatos, A. P., & Kammen, D. M. (2009). Materials availability expands the opportunity for large-scale photovoltaics deployment. *Environmental science & technology*, **43(6)**, **2072-2077**.





# بررسی خواص ساختاری و الکترونی ترکیب پتاسیم سولفید در فاز مکعبی(بلند-روی) صالحی ، حمداله <sup>۱</sup> ؛ جامعی ، محمدمهدی <sup>۱</sup>،عزیزی، مریم <sup>۱</sup>

اگروه فیزیک،دانشکدهٔ علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران

حكىدە

در مقالهٔ حاضر ویژگیهای ساختاری و الکترونی ترکیب پتاسیم سولفید نظیر چگالی حالتها، ساختار نواری و مدول حجمی در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی مورد بررسی قرار میگیرد. محاسبات با استفاده ا ز روش شبه پتانسیل بار پایسته با تفریبهای شیب تعمیم یافته (GGA) و چگالی موضعی (LDA) و کد محاسباتی کوانتوم-اسپرسو انجام شده است. نتایج به دست آمده از ساختار نواری نشان میدهد که این ترکیب در فاز مکعبی(بلند-روی) نیمفلز بوده و دارای گاف نواری مستقیم در نقطهٔ ۲ میباشد. مقادیر محاسبه شده برای گاف نواری و مدول حجمی این ماده به ترتیب در تفز مکعبی(بلند-روی) نیمفلز بوده و دارای گاف نواری گیگاپاسکال و در LDA برابر با ۶۱/۲ الکترونولت و ۱۵/۱ گیگاپاسکال یافت شده است، که با داده های موجود سازگاری دارد.

**واژه های کلیدی:** پتاسیم سولفید، خواص ساختاری، خواص الکترونی، مدول حجمی.

## Study of the structural and electronic properties of potassium sulfide compound in the cubic phase

Salehi, Hamdollah ; Jamei, Mohammadmehdi ;Azizi, Maryam

<sup>1</sup> Department of physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran

#### Abstract

In this paper, the structural and electronic properties of potassium sulfide compound such as density of states, band structure and bulk modulus are investigated in the framework of density functiontional theory. Calculations have been performed using the norm conserving pseudopotential and in the generalized gradient approximations (GGA) and local density (LDA) in the quantum-espresso computational code. The results obtained from the band structure show that this compound is a half-metal in the phase of the cubic crystal structure (zinc-blend) and has a direct band gap at the  $\Gamma$  point. The calculated values for the band gap and bulk modulus of this material were found in GGA approximations equal to 4.23 eV, 11.1 GPa and LDA equal to 4.17 eV, 15.6 GPa respectively.

Keywords: potassium sulfide, structural properties, band structure, bulk modulus.

PACS No.70

توسط گروت و همکاران بیان شد [۳]. در ترکیبات نیمفلزی، یکی از دو کانال اسپینی نیمرسانا یا عایق و دیگری فلز است. فرومغناطیسهای نیم فلز به دلیل قطبش اسپینی ۱۰۰٪ در سطح فرمی برای تزریق اسپین در نیمرساناها مورد توجه قرار می گیرند. مواد مغناطیسی جدید دارای دمای کوری بالاتر از دمای اتاق هستند و برای ساخت قطعات اسپینترونیک نسبت به موادمغناطیسی

مقدمه

ترکیب پتاسیم سولفید از دو عنصر پتاسیم و گوگرد تشکیل شده که با نماد KS بیان می شود [۱] و این ترکیب از جمله فرومغناطیس – های نیمفلزی هستند که اولین بار گائو و همکاران با استفاده از بستهٔ محاسباتی Wien2k مورد مطالعه قرار دادند [۲]. اولین پیشگویی این مواد مربوط به ترکیبات هویسلر، در سال ۱۹۸۳ ڎٳڹؿڲٳڋ ڛۿؿؽۑ

## نتايج

الف:خواص ساختاري

ابتدا از طریق محاسبهٔ انرژی همدوسی و با استفاده از رابطهٔ زیر پایداری ساختاری را مورد بررسی قرار دادیم:

(۱)  $E_{cohesive} = E_{Bulk} - E_{Isolatedatom}$  (۱) که با جایگذاری مقادیر محاسبه شده در معادلهٔ بالا انرژی همدوسی که با جایگذاری مقادیر محاسبه شده در معادلهٔ بالا انرژی همدوسی در تقریبهای GGA و LDA برای این ساختار به ترتیب 2/000 و 2/000 به دست آمد که نتیجه بیانگر پایداری ترکیب بوده و این پایداری در تقریب چگالی موضعی پایداری ترکیب بوده و این پایداری در تقریب چگالی موضعی GGA بیشتر است. در ادامه مقدار بهینهٔ پارامترهای شبکه در تقریب های موضعی GGA بیشتر است. در ادامه مقدار بهینهٔ پارامترهای شبکه در تقریب های GGA و 0.000 به ترتیب ۵/000 بیشتر است. در ادامه مقدار بهینهٔ پارامترهای شبکه در تقریب های GGA و 0.000 بیشتر است. در ادامه مقدار بهینهٔ پارامترهای شبکه در تقریب ای GGA بیشتر است. در ادامه مقدار بهینهٔ پارامترهای شبکه در تقریب یای و 0.000 به ترتیب ۲۰۰۰ بیشتر ای ساختار محبی (بلند-روی) به ترتیب ۲۰۰۰ و 1000 بی و 0.000 به ترتیب (بلند-روی) به ترتیب (۲۰۰۰ بیش با برازش نمودارهای انرژی بر حسب حجم و استفاده از معادلهٔ مورناگون [۸]:  $E(V) = E_0 + \left[\frac{V}{V_0} + \frac{(V/V_0)^{1-B'} - B'}{B'-1}\right]$ 

که در رابطهٔ فوق،  $V_0$  حجم سلول اولیه،  $E_0$  انرژی حالت پایه در دما و فشار صفر B و 'B بهترتیب مدول حجمی و مشتق آن هستند. نمودار انرژی–حجم و مقدار مدول حجمی به دست آمده در شکل و جدول(۲) آورده شده و مقدار مدول حجمی در تقریب LDA نسبت GGA بزرگتر بوده و دور از انتظار نیست، زیرا مقدار ثابت شبکه در تقریب LDA نسبت به تقریب GGA کوچکتر است. بنابراین در این تقریب بلور سخت ر بوده است.



شکل ۲: نمودار حجم بر حسب انرژی ترکیب پتاسیم سولفید در تقریبهای (الف) شیب تعمیم یافته و(ب) چگالی موضعی.

ارجحیت دارند، بنابراین در صنعت اسپینترونیک مورد توجه بسیاری قرار گرفتهاند [٤]. ترکیب پتاسیم سولفید به عنوان منابع انرژی برای دستگاههای الکترونیکی قابل حمل مانند لپتاپ و دوربینهای دیجیتال استفاده می شوند [٥]، به همین دلیل برای مطالعات نظری و تجربی ایده آل هستند. باتری های KS به علت هزینهٔ پایین، در دسترس بودن مواد اولیه و رفتار الکتروشیمیایی مورد توجه قرار می گیرند [٤]. از آن جا که تاکنون هیچ گونه مشاهدهٔ آزمایشگاهی برای ترکیب KS یافت نشده، لذا در کار حاضر، پایداری ساختاری را مورد بررسی قرار می دهیم.

## روش انجام محاسبات

محاسبات در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی [7]و با اعمال تقریب شیب تعمیم یافته [۷] (GGA-pbe) و تقریب چگالی موضعی (۲] (LDA-pw) انجام و نتایج محاسبات این دو تقریب باهم مقایسه می شوند. محاسبات با استفاده از کد PWscf توسط بستهٔ محاسباتی کوانتوم-اسپرسو انجام شده است [۷]. مقدار مش بندی محاسباتی کوانتوم-سپرسو انجام شده است [۷]. مقدار مش بندی نقریبهای GGA و LDA به ترتیب برابر با ۸×۸×۸ و ۷×۷×۷ در نظر گرفتیم. تمامی پارامترها اعم از انرژی قطع تابع موج، نقاط k و ثابتهای شبکه ابتدا بهینه سازی شده اند. انرژی قطع تابع موج پس ز بهینه سازی ۷۰Ry منظور شد. شبه پتانسیل های انتخابی از نوع بار پایسته بوده و در جدول(۱) تفکیک الکترون های مغزه و ظرفیت عناصر ترکیب KS آورده شده است.

جدول ۱ : تفکیک الکترون های مغزه وظرفیت عناصر ترکیب پتاسیم سولفید.

نام عنصر	الكترونهاي مغزه	الكترونهاي ظرفيت
К	$\begin{bmatrix} Ar \end{bmatrix}$	$4s^{1}$
S	[Ne]	$3s^2 3p^4$

طرحوارهٔ ترکیب مورد نظر در شکل(۱) قابل مشاهده است.



شکل ۱: ساختار بلوری ترکیب پتاسیمسولفید در فاز مکعبی.





شکل ٤: نمودار ساختار نواری ترکیب پتاسیم سولفید در تقریب شیب تعمیم یافته در(الف) کانال اسپینی بالا و(ب) کانال اسپینی پایین.



شکل ۵: نمودار ساختار نواری ترکیب پتاسیمسولفید در تقریب چگالی موضعی در(الف) کانال اسپینی بالا و(ب) کانال اسپینی پایین.

نمودار چگالی حالتها ابزاری مناسب برای بررسی ویژگیهای الکترونی است. در شکل(٦) و (٧) چگالیحالتهای کلی و جزئی ترکیب KS در تقریبهای GGA و LDA رسم شده است. فرومغناطیسهای نیمفلز در یک کانال اسپینی همانند نیمرسانا یا عایق و در کانال اسپینی دیگر مانند فلزات رفتار میکنند [۹]. با

جدول۲ : پارامترهای ساختاری محاسبه شده در این کار همراه با نتایج دیگران.

تركيب	مقادير	GGA	LDA	دیگران [۲]
	ثابت شبكه	٧/•٢٥٠	٦,٧٣٤٠	٦,٤٨
پتاسيم سولفيد	$a_0(A^0)$			
	B(Gpa)	11/1	١٥٫٦	-
	$\mathbf{B}'$	٤/٦٢	٥/٤٤	-

#### ب:خواص الكتروني

از جمله روش های تعیین کنندهٔ گاف می توان به نمودار ساختار نواری و چگالی حالت ها اشاره کرد [۸]. ساختار نواری ترکیب پتاسیم سولفید با استفاده از تقریب GGA و LDA در شکل(۳) نشان داده شده و همچنین در شکل(٤) و (٥)، ساختار نواری در کانال اسپینی بالا و پایین برای هر دو تقریب محاسبه شده است. در شکل(۳) تراز فرمی، نوارها را قطع نمی کند و دارای گاف نواری مستقیم در نقطهٔ ۲ می باشد که این مقدار برای تقریبهای GGA و LDA به ترتیب ۲۲۶ و ۲/۱۷ الکترون ولت است، اما در شکل(٤) و (٥) در هر دو تقریب در کانال اسپینی پایین، تراز فرمی، نوارها را قطع کرده و ترکیب در فاز مکعبی نیم فاز بوده که از دو کانال اسپینی عایق و نیم رسانا، تشکیل شده.



شکل ۳: نمودار ساختار نواری ترکیب پتاسیمسولفید در تقریبهای (الف) شیب تعمیم یافته و (ب) چگالی موضعی.

توجه به این تعریف و نمودارهای چگالی حالتهای کلی و جزئی در شکل (٦) و (٧)میتوان گفت ترکیب KS در ساختار مکعبی(بلند-روی) دارای ویژگی نیمفلزی است؛ زیرا در کانال اسپین بالا خط فرمی، نمودار چگالی حالتها را قطع نمیکند و در اطراف سطح فرمی یک گاف انرژی وجود دارد [١٠]. وجود همین گاف انرژی در چگالی حالتها در اسپین بالا، موجب قطبش اسپینی کامل در تراز فرمی و بوجود آمدن خاصیت فرومغناطیس نیمفلزی میشود. طبق نمودار های چگالی حالتهای جزئی در هر است و اوربیتالهای ۱۶ اتم پتاسیم، ۲۵ اتم پتاسیم و ۲۵ اتم گوگرد سهم ناچیزی را شامل میشوند.







شکل۷: نمودار چگالی حالتهای ترکیب پتاسیمسولفید در تقریب چگالی موضعی (الف) کلی (ب) جزئی اتمها.

# نتيجه گيرى

در این مقاله به بررسی ویژگی نیمفلزی ترکیب KS با اعمال تقریب های GGA و LDA در ساختار مکعبی(بلند-روی) پرداختیم. با توجه به محاسبات صورت گرفته ترکیب در ساختار مکعبیتحت دو تقریب پایدار است و دارای نظم فرومغناطیس می باشد و در اسپین بالا عایق و اسپین پایین فلز است. این ترکیب نیمفلزی است و گاف نیمفلزی دارد که این گاف به ترتیب برای تقریب های GGA و LDA مقادیر ۲/۳ و ۲/۱۷ الکترون ولت محاسبه شد.

#### مرجعها

[۱] رزنیک، رابرت؛ هالیدی، دیوید و کرین، کنت؛ «فیزیک» مرکز نشر دانشگاهی؛ ۱۳۸۹.

[Y] G.Y. Gao, K.L. Yao, M.H. Song and Z.L. Liu; "Half-metallic ferromagnetism in rocksalt and zinc-blende MS (M= Li, Na and K): a firstprinciples study"; *Journal of magnetism and magnetic materials* 323, No. 21 (2011) 2652-2657.

[<sup>r</sup>]R. A. de Groot, F. M. Mueller, P. G. van Engen and K. H. J. Buschow; "New Class of Materials: Half-Metallic Ferromagnets"; *Physical Review Letters* 50, No. 25 (1983) 2024.

[\*] J. Ding, H. Zhang, W. Fan, Ch. Zhong, W. Hu and D. Mitlin; "Review of emerging potassium-sulfur batteries"; *Advanced Materials* 32, No. 23 (2020) 1908007.

[4]YU. Peter, M. Cardona; "Fundamentals of semiconductors: physics and materials properties,5<sup>th</sup> edition, Springer Science & Business Media. (2010).

[Y] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, et al; "QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials"; *Journal of physics: Condensed Matter* 21, 395502 (2009).

[۸] صالحی، حمداله ؛ و حسینی، سمیه ؛ «محاسبهٔ خواص ساختاری لانتانیم

کرومیت در فاز مکعبی با استفاده از روش امواج (تخت تقویت شده خطی با

پتانسیل کامل FP-LAPW) »؛ مجلهٔ فیزیک کاربردی دانشگاه الزهرا، سال ٦،

شمارهٔ ۱، بهار و تابستان ۱۳۹۵، صفحه ۷۳ تا ۸۷

[9] D. J. Rasky and F. Milstein; "Pseudopotential theoretical study of the alkali metals under arbitrary pressure: Density, bulk modulus, and shear moduli"; *Physical Review B* 33, No. 4 (1986) 2765.

[۱۰] امیری، پیمان ؛ صالحی، حمداله و کاظمی، مرجان ؛ «مطالعهٔ ابتدا به ساکن



# بررسی ویژگی ساختاری و الکترونی ترکیبات ایتریم کرومیت و لانتانیم کرومیت در فاز مکعبی

صالحی ، حمداله <sup>۱</sup> ؛ خادمیان ، فاطمه <sup>۱</sup>، عزیزی، مریم <sup>۱</sup> ، کروه فیزیک، دانشکدهٔ علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهران

چکیدہ

در این مقاله ویژگی های ساختاری و الکترونی ترکیبات ایتریم کرومیت و لانتانیم کرومیت نظیر مدول حجمی، ساختار نواری و چگالی حالتها مورد بررسی قرار میگیرد. محاسبات با استفاده از روش شبه پتانسیل در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی با تقریب شیب تعمیم یافته (GGA)، توسط کد محاسباتی کوانتوم-اسپرسو انجام شده است. نتایج برگرفته از ساختار نواری نشان میدهد که این دو ترکیب در فاز مکعبی فلز بوده و فاقد گاف نواری میباشد. مقدار به دست آمده برای مدول حجمی درمورد لانتانیم کرومیت ۹۱٫۲ و ایتریم کرومیت برابر ۹۱٫۲۱ گیگاپاسکال است.

واژه های کلیدی: ایتریم کرومیت، لانتانیم کرومیت، خواص ساختاری، ساختار نواری.

#### Study of the structural and electronic properties of yttrium chromate and lanthanum chromate in cubic phase Salehi, Hamdollah; Khademian, Fatemeh ,Azizi, Maryam

<sup>1</sup> Department of physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran

#### Abstract

In this paper, structural and electronic properties of yttrium chromate and lanthanum chromate compounds such as bulk modulus, band structure and density of states are study. Calculations have been performed by using The pseudopotential method in the framework of the density functional theory with generalized gradient approximation (GGA), by quantum-espresso Package. The results obtained from the band structure show that these two compounds are metalic in The cubic phase and do not have a band gap. The obtained value for the bulk modulus of lanthanum chromite is 59.2 and yttrium chromite is 91.2 GPa.

Keywords: Yttrium chromate, Lanthanum Chromate, structural properties, band structure

PACS No: 70

دارند [۵]. این ترکیبات مغناطیسی بوده اما فروالکتریسیته را در تک فاز خالص نشان نمیدهند و ترکیب آنها با هم منجر به افزایش خواص فروالکتریکی در این دو ترکیب میشود. YCrO<sub>3</sub> یک فرومغناطیس زیر دمای ۱٤۰ کلوین بوده و گذار فاز در ٤٧٣ کلوین [7] و LaCrO<sub>3</sub> نیز انتقال فاز پادفرومغناطیس نزدیک به دمای اتاق در ۲۹۰ کلوین را نشان میدهد. بالاتر از این دما لانتانیم کرومیت پارامغناطیس است و ایجاد پیوند کوالانسی قوی بین اتم-های کروم و اکسیژن میکند [۷]. لذا ایتریم کرومیت و لانتانیم کرومیت به علت کاربردهای متنوع در زمینههای مختلف نظری و

#### مقدمه

ترکیبات با فرمول شیمیایی ABO به عنوان ترکیبات پرووسکیت شناخته شده [۱] و دارای خواص فیزیکی متعدد (مقاومت مغناطیسی بزرگ، گذار فلز به عایق، چندفروئی و غیره) بسیار جذاب بوده و برای طیف وسیعی از قطعات نانو، ضبط کنندههای مغناطیسی با چگالی بالا، حسگرها و اسپینترونیک استفاده می-شوند [٤-۲]. پرووسکیتهای کرومیت (ACrO<sub>3</sub> و LaCrO<sub>3</sub>) برپایهٔ خاکهای کمیاب در زمینههای مختلف مانند اتصال سلولهای سوختی اکسید جامد، حسگرهای رطوبت و غیره کاربرد

تجربی، موضوعی مناسب جهت بررسی میباشند. در سال ۲۰۰۵ سرائو و همکاران ساختار و انرژی ایتریم کرومیت با نظم فرومغناطیس و پادفرومغناطیس توسط روش شبهپتانسیل فوق نرم در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی و بستهٔ محاسباتی کوانتوم اسپرسو بررسی کردند و نتایج نشان داد که این ماده در فاز مکعبی نیمرسانا بوده و به ترتیب دارای گاف ۱٫۸ و ۱٫۳ الکترون ولت در حالت نظم فرومغناطیس و پادفرومغناطیس است [٨]. در سال ۲۰۱۸ احمد و همکاران خواص مغناطیسی YCrO<sub>3</sub> حجیم در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی با تقریب شیب تعمیم یافته و بستهٔ محاسباتی Wien2k محاسبه کردند [۳]. در سال ۲۰۰۸ ری و همکاران با استفاده از محاسبات اصول اولیه در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی و با روش شبهپتانسیل فوق نرم و تقریب شیب تعمیم يافته توسط بستهٔ محاسباتی PWSCF به بررسی ناپايداری ساختاری در ساختار پرووسکیت مکعبی با تقارن بالا در خاکهای کمیاب R = (La,Y) و کرومیتهای بیفروئیک پرداختند و بر روی نقاط فونونی T و R حالتهای پارا، فرو و پادفرومغناطیس متمرکز شدند و متوجه شدند که ساختار با نظم یاد فرومغناطیسی نوع G پايدارترين است [۹].

## روش انجام محاسبات

محاسبات در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی، با تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) و تابعی مورد استفاده از نوع [۱۰] PBE ، توسط بستهٔ محاسباتی کوانتوم اسپرسو انجام شده است. در محاسبات همگرایی بر مبنای انرژی بوده که با انرژی <sup>۲</sup>-۱۰ ریدبرگ به ممگرایی رسیده ایم. اربیتال های مورد استفاده در این شبه پتانسیل برای اتمهای ایتریم d، لانتانیم 50 68، کروم 48 و اکسیژن 282p میباشند. تفکیک الکترونهای مغزه و ظرفیت در جدول(۱) آورده شده است. ثابت شبکههای بلوری ناشی از دادههای تجربی و مشبندی به ترتیب برای لانتانیم کرومیت ۲۰۲۷ههای تجربی و مشبندی به ترتیب برای لانتانیم کرومیت دارای ثابت شبکه انگستروم و مشربندی ۲۰×۱۰ ۱۰ است.

جدول ۱ : تفکیک الکترون های مغزه، ظرفیت و هم چنین عدد اتمی عناصر

تركيب ايكريم كروكتيك والألكانيم كروكتيك.							
نام عنصر	عدداتمي	الكترونهاي مغزه	الكترونهاي ظرفيت				
Y	٣٩	$[Kr]5s^2$	$4d^{1}$				
La	٥٧	[Xe]	$6s^2,5d^1$				
Cr	٢٤	$\left[Ar\right]3d^{5}$	$4s^{1}$				
0	٨	[He]	$2s^2$ , $2p^4$				

طرحواره های این دو ترکیب در شکل(۱) نشان داده شده است.





(الف) شکل ۱: ساختار بلوری(الف) ایتریم کرومیت و(ب) لانتانیم کرومیت در فاز مکعبی.

نتایج الف:ویژگیهای ساختاری

هرچند در نظریهٔ تابعی چگالی داده هایی که در محاسبات وارد میشوند اصولاً از تطبیق خوبی با دادههای تجربی و نظری برخوردار هستند اما با برازش نمودارهای انرژی بر حسب حجم به پارامترهای ساختاری دسترسی پیدا می کنیم که با استفاده از معادلهٔ مورناگون به دست میآید [۱۱]:

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

که در رابطهٔ فوق،  $V_0$  حجم سلول اولیه،  $E_0$  انرژی حالت پایه در دما و فشار صفر B و B' به ترتیب مدول حجمی و مشتق آن هستند[۱۱]. نمودارهای مدول حجمی و مقادیر آنها در شکل(۲) و جدول(۲) قابل مشاهده است.



جدول۲ : پارامتر های ساختاری بررسی شده در این کار همراه با نتایج دیگران با

استفاده از شیب تعمیم یافته.



شکل۲: نمودار حجم بر حسب انرژی (الف) ایتریم کرومیت و (ب) لانتانیم کرومیت .

#### ب:ویژگیهای الکترونی

یکی از موارد مهم در تشخیص گاف نواری نمودار ساختار نواری است. از روشهای تعیین کنندهٔ گاف، ساختار نواری و چگالی حالتها است. ساختار نواری برای ترکیبات ایتریم کرومیت و لانتانیم کرومیت در شکل (۳) نشان داده شده است. هم چنین در شکل (٤) ایتریم کرومیت در کانال اسپینی بالا فلز و در کانال اسپینی پایین نیم فلز بوده و دارای گاف نواری ۲/۵۷۱۱ الکترون ولت میباشد. در شکل (٥) نیز با توجه به کانالهای اسپینی بالا و پایین میتوان متوجه شد که تراز فرمی، نوارها را قطع کرده و

لانتانیم کرومیت در فاز مکعبی فلز میباشد که با دیگر دادههای موجود نیز سازگاری دارد.



شكل " : نمودار ساختار نواري تركيب هاي (الف) ايتريم كروميت و (ب) لانتانيم



شکل ٤ : نمودار ساختار نواری ترکیب ایتریم کرومیت در کانال اسپینی(الف) بالا و (ب) پایین.





# نتيجه گيرى

در این مقاله ویژگیهای ساختاری و الکترونی ترکیبات لانتانیم کرومیت و ایتریم کرومیت در فاز مکعبی با روش شبهپتانسیل فوقنرم و تقریب GGA توسط کدمحاسباتی کوانتوم اسپرسو مورد بررسی قرار گرفتند . نتایج به دست آمده از ساختار نواری بیانگر فلز بودن لانتانیم کرومیت بوده و ایتریم کرومیت نیز در کانال اسپینی پایین دارای گاف نواری ۲٬۵۷۱۱ ولت الکترون می– باشد.

## مرجعها

[1] B. Rameshe; "Electronic Band Structure, Structural Phase Stability, Optical, Vibrational and Thermoelectric Properties of Some Double Perovskite Strontium and Barium Based Oxides" *Ph.D. Thesis*, Pondicherry Engineering College, India (2016).

[Y] J. W. Fergus; "Perovskite oxides for semiconductor-based gas sensors"; *Sensors and Actuators B: Chemical* **123**, No. 2 (2007) 1169-1179.

[<sup>r</sup>] S. S. Ahmed, G. D. Ngantso, M. Boujnah, A. Benyoussef, A. EL. Kenz; "Ab initio and Monte Carlo studies of phase transitions and magnetic properties of YcrO3: Heisenberg model"; *Physics Letters A* 383, No. 2-3 (2019) 121-126.

[٤] حسینی، سمیه ؛ «تعیین ساختار الکترونی و ساختار نوارهای انرژی ترکیب

لانتانیم کرومیت»؛ *پایان نامهٔ کارشناسی ارشد*، دانشگاه شهید چمران اهواز

.(١٣٨٦)

[°] P. Saxenaa and D. Varshney; "Structural and electrical properties of Sr doped YcrO3"; *AIP Conference Proceedings* **1942**, No. 1 (2018)110040 [<sup>1</sup>] M. K Gupta, R. Mittal, S. K Mishra1, P. Goel1, B. Singh, S. Rols and S. L Chaplot; "Spin-phonon coupling and thermodynamic behaviour in YCrO3 and LaCrO3: inelastic neutron scattering and lattice dynamics"; *Journal of Physics: Condensed Matter* **32**, No. 50 (2020) 505402

[V] I. Koriba, B. Lagoun, A. Cheriet, A. Guibadj, S. Belhadj, A. Ameur, L.

Aissani and A. Alhussein; "Phase stability, mechanical and optoelectronic properties of lanthanum chromite-based perovskite oxide"; *Applied Phys A* **128**, No. 1 (2022) 1-16.

[A] C. R. Serrao, A. K. Kundu, S. B. Krupanidhi, U. V. Waghmare and C.

N. R. Rao; "Biferroic YCrO<sub>3</sub>"; *Phys. Rev. B* 72, 220101(2005).

[9] N. Ray and U. V. Waghmare; "Coupling between magnetic ordering and structural instabilities in perovskite biferroics: A first-principles study"; *Physical Review B* **77**, No. 13 (2008) 134112.

[1.] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, et al;

"QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials"; *Journal of physics: Condensed Matter* **21**, 395502 (2009).

[۱۱] صالحی، حمداله ؛ و حسینی، سمیه ؛ «محاسبهٔ خواص ساختاری لانتانیم

کرومیت در فاز مکعبی با استفاده از روش امواج ( تخت تقویت شده خطی با

يتانسيل كامل FP-LAPW) »؛ مجلة فيزيك كاربردى دانشگاه الزهرا، سال ٦،

شمارهٔ ۱، بهار و تابستان ۱۳۹۵، صفحه ۷۳ تا ۸۷.

از شکل (٦) دریافتیم که بلندترین قلهها برای هر دو ترکیب نزدیک به انرژی صفر و تأیید کنندهٔ نتایج ساختار نواری، هم چنین همسانگرد بودن آنها است. در شکل(۷)، (الف) بیشترین مشارکت در نوار ظرفیت مربوط به اربیتال ٤៨ اتم Cr و اربیتالهای ۳۵ – Cr م 70 و qo - Y دارای مشارکت ناچیز هستند. در انتهای نوار رسانش در بازهٔ انرژی ۲ تا ٥ الکترون ولت اربیتالهای ۳۵ – Cr و ٤d – Cr مشارکت در نوار رسانش دارند. شکل(۷)، (ب) نیز بیشترین مشارکت در نوار ظرفیت مربوط به اربیتال ٤٤ اتم Cr بوده بیشترین مشارکت در نوار ظرفیت مربوط به اربیتال ٤٤ اتم Cr بوده مه دارای و اربیتالهای ۲۵ – Cr ماه مدر انتهای نوار رسانش در بازهٔ ۱۵٫۵ تا ۶۵ مشارکت ناچیز هستند. در انتهای نوار رسانش در بازهٔ ۱٫۵ تا ۶۵











# مطالعه پذیرفتاری نوری غیر خطی مرتبه سوم ((<sup>(3)</sup>)وعامل فلزیشدگی نانوذرات سلنید روی آلاییده به مس رشد یافته توسط تابش مایکرویو

#### مقدسی نژاد، عرفانه؛ سوری، داریوش؛ خضری پور، علیرضا

دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک، دانشگاه ملایر، ملایر

### چکیدہ

نانوذرات سلنید روی با درصدهای مختلف ناخالصی مس سنتز و تحت تابش مایکرویو در محیط آبی رشد یافتند. نتایج گزارش شده قبلی از مشخصهیابی پراش پراش سلند روی با درصدهای مختلف ناخالصی مس سنتز و تحت تابش مایکرویو در محیط آبی رشد یافتند. نتایج گزارش شده قبلی از مشخصهیابی پراش پرتو ایکس و طیف فرابنغش – مرئی محلولهای حاوی نانوذرات، محدوده ۲/۱۲ - ۲۶/۱۷نومتر را برای اندازه نانوبلورها و ۲/۱۳ - ۲/۱۳ الکترون ولت را برای گاف انرژی نانوذرات سلنید روی نشان می دهند. نتایج حاکی از آن است که این نانوذرات پتانسیل بالایی در کاربردهای نوری و اپتوالکترونیکی دارند. در این پژوهش انرژی نانوذرات سلنید روی نشان می دهند. نتایج حاکی از آن است که این نانوذرات پتانسیل بالایی در کاربردهای نوری و اپتوالکترونیکی دارند. در این پژوهش پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم<sup>((۳)</sup> ۲) نانوذرات و از این میان، نمونه ۲/۱۰ ناخالصی مس با توجه به بالاترین <sup>(۳)</sup> ۲)، گزینهی بهینه در کاربردهای اپتوالکترونیکی و ایتوالکترونیکی دارند. در این پژوهش اپتوالکترونیکی و ایتوالکترونیکی دارند. در این پژوهش پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم<sup>((۳)</sup> ۲) می دهند. نتایج نشان می دهد که <sup>(۳)</sup> ۲) نانوذرات و از این میان، نمونه ۲/۱۰ ناخالصی مس با توجه به بالاترین <sup>(۳)</sup> ۲)، گزینهی بهینه در کاربردهای اپتوالکترونیک و انتقال سیگنال است. همچنین نتایج نشان می دهد که <sup>(۳)</sup> ۲) با گاف انرژی رابطه معکوس دارد و با افزایش درصد ناخالصی مس افزایش می یابد. اپتوالکترونیک و انتقال سیگنال است. همچنین نتایج نشان می دهد که <sup>(۳)</sup> ۲) با گاف انرژی رابطه معکوس دارد و با افزایش درصد ناخالصی می افزایش می یابد. علاوه بر این نتایج حاصل،مقدار عامل فلزی شدگی با افزایش ناخالصی و تابش مایکرویو کاهش می یابد که نشان دهنده افزایش میل فلزی نمونه ها می یاشد.

The study of the third order non-linear optical susceptibility and  $(\chi^{(3)})$  metallization factor of Cu-doped zinc selenide nanoparticles grown by microwave irradiation

Moghaddasi nezhad, Erfaneh; Souri, Dariush; Khezripour, Alireza

Faculty of Science, Department of Physics, Malayer University, Malayer

#### Abstract

Cu-doped ZnSe nanoparticles (NPs) at the presence of different Cu contents were synthesized and grown under microwave irradiation in aqueous media. Previously reported results of X-ray diffraction characterization and UV-Visible spectroscopy of solutions containing nanoparticles, show the range of 1.94–2.14 for the size of nanocrystals and 3.342–3.615 eV for their energy gap. In this research, non-linear optical susceptibility ( $\chi^{(3)}$ ) of ZnSe:Cu nanoparticles were determined; results imply on that these nanoparticles have a high potential in optoelectronic and signal transport applications. Results indicate the inverse relation between the energy gap and  $\chi^{(3)}$ , as the optimum candidate in optical applications. Also, according to the obtained results, the metallization factor decreases with the increase of impurity and microwave irradiation, showing the increase of metallization tendency.

PACS: 78,81

بودن از نظر محیطی نامطلوب هستند و با توجه به سمیت کمتر نانوذرات بر پایه روی، سنتز این نانوذرات موردتوجه محققان قرارگرفته است [۳]. سلنید روی یکی از مهمترین نیمرساناهای-II VI گاف انرژی پهن (۲/ eV) در حالت توده و شعاع بوهر ۸ نانومتر در دمای اتاق است. به همین دلیل انتخاب مناسبی برای تولید نور آبی-فرابنفش است در حالیکه نورتابی با این طول موج برای نانوذرات کادمیومی غیرقابل دستیابی است [٤]. هدف پژوهش حاضر, سنتز و رشد نانوذرات سلنید روی آلاییده به مس

مقدمه

نانوذرات نیمرسانا به دلیل خواص نوری و الکترونی وابسته به اندازه شان در دههی اخیر موضوع پژوهش های بسیاری بوده اند[٤-١]. در این میان نانوذرات نیمرسانای II-VI به دلیل کاربردگسترده در دیودهای نورگسیل، سنسورها، سلولهای خورشیدی و... توجه بیشتری را به خود معطوف نموده اند [۲]. درمیان نانوذرات نیمرسانای II-VI, نانوذرات بر پایه کادمیوم به دلیل سمی



و بررسی پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم و همچنین عامل فلزی شدگی آنهاجهت تعیین نمونه بهینه در کاربردهای اپتوالکترونیکی است.

# روش آزمایشگاهی سنتز نانوبلورهای ZnSe:Cu

جهت ساخت نانوذرات سلنیدروی به روش آبی، مقادیر مشخص سلنیوم پودری و سدیم بوروهیدرید در ۲ میلی لیتر آب دیونیزه گاززدایی شده تحت شارش گاز آرگون در بالنی سه دهانه حل شده و حجم محلول با استفاده از ۲ میلیلیتر آب دیونیزه به ۸ میلی لیتر افزایش یافت. سپس محلول حاصل به درون یک سرنگ فيلتردار منتقل مي شود. اين محلول سديم هيدروسلنيد ('NaHSe)، منبع يون سلنيوم است كه آماده تزريق به منبع يون روى مىباشد. به منظور تهیه منبع یون روی، پودر استات روی درون ۷۵ میلی ليتر آب ديونيزه حل شده و پس از آماده شدن محلول، سديم هیدروسلنید در حضور عامل پوششی TGA و در pH ثابت به آرامی و پیوستگی به آن تزریق می شود. در ادامه، جهت بررسی تاثیر یونهای فلزات واسطه به عنوان ناخالصیهای موجود در شبکه، یودر استات مس در مقدار مشخصی آب دیونیزه حل شده و با توجه به درصد موردنظر برای ناخالصی مس ، محلول حاوی یونهای ناخالصی به محلول استات روی اضافه و نمونههای بدون ناخالصی و دارای ناخالصی در pH=11.2 تهیه شدند. سپس جهت رشد نانوذرات , محلولها بهمدت ٦دقيقه تحت تابش مایکرویوقرار گرفتند. جهت بررسی خواص نوری نانوذرات از طيف UV-Visible و به منظور بررسی خواص ساختاری نمونههای مورد پژوهش توسط آنالیزXRD، محلول نهایی سانتریفیوژ و نمونههای پودری تهیه و مورد استفاده قرار گرفتند.

# نتایج و بحث آنالیز XRD

شکل ۱ الگوی پراش پرتو ایکس نانوذرات نوعی ZnSe:Cu(0.1%) را نشان میدهد که تحت تابش مایکرویو قرار گرفته اند. مکان سه قله مهم مشاهده شده در زوایای ۲۹ در این الگو به ترتیب منطبق بر صفحات (۱۱۱)، (۲۲۰) و (۳۱۱) که نشان

دهنده ساختار fcc برای این نانوبلورها می باشد. با توجه به این که مکان قلههای پراش در این الگو با افزایش دما بدون تغییر مانده است, میتوان نتیجه گرفت که افزایش تابش مایکرویو تاثیری بر ساختار بلوری نانوذرات سلنیدروی ندارد و نمونه ها شبکه براوه یکسانی در غیاب و حضور تابش مایکرویو دارند.



شکل ۱: الگوی پراش پرتو ایکس نانوذرات (ZnSe:Cu (0.1% سنتز شده در pH=11.2 در زمان های ۰ و ۲ دقیقه تابش امواج مایکروویو.

# گاف انرژی فرابنفش-مرئی

شکل ۲ طیفهای جذب مربوط به نانوذرات نوعی (%ZnSe:Cu (0.1 را تحت زمانهای ۰ و ۲ دقیقه مایکرویو نشان میدهد.



شکل۲: طیف جذب نوری ناحیه فرابنفش-مرئی نانوذرات ZnSe:Cu (0.1%) در زمان های ۰ و ٦ دقیقه تابش مایکرویو ۰

در کار حاضر, از روش DASF [<sup>۵</sup>] به عنوان روشی دقیق و کارآمد برای یافتن گاف انرژی و نوع گذار نوری مواد



نیمرسانا بهره گرفته که در ادامه فرمولبندی این روش بیان شده است.

$$A(\lambda) = D\lambda \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_g}\right)^m \tag{1}$$

$$\frac{d\left[ln\left(\frac{A}{\lambda}\right)\right]}{d\left(\frac{1}{\lambda}\right)} = \frac{m}{\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_{g}}}$$
(7)

در روابط بیان شده، **A**، **A**، **م**، **و D** و **m** به ترتیب جذب نوری، طول موج تابشی، طول موج منتسب به گاف انرژی، یک مقدار ثابت و شاخص گذار نوری(که به ترتیب بسته به نوع گذار مستقیم مجاز، غیرمستقیم مجاز، مستقیم ممنوع و غیرمستقیم ممنوع می تواند دارای مقادیر ۲/۲، ۲، ۲/۲ و ۳ باشد) می باشند. طبق رابطه ۲، نمودار شکل ۳ در  $\frac{1}{26}$  دارای یک ناپیوستگی خواهد بود که با تعیین مکان ناپیوستگی در این نمودار، مقدار طول موج گاف انرژی نوری با دقت تعیین خواهد شد و بدین ترتیب گاف انرژی بدست خواهد آمد (جدول ۱).

$$E_g^{DASF}(eV) = \frac{hc}{\lambda_g} = \frac{1239.83}{\lambda_g} \tag{(7)}$$



شکل۳: نمودار DASF نانوذرات (%2.0 NSe:Cu سنتز شده در pH=11.2 در تابش ۰ و٦ دقیقه مایکروویو.

آنچنانکه در نمونهی نوعی مطرح در شکل(۳) مشهود است(و البته بر اساس نتایج کامل مندرج در جدول۱ نیز در سایر نمونهها به همین نحو است),با تابش مایکرویو و همچنین افزایش درصد ناخالصی مس, لبهی جذب به سمت طول موجهای بلند جابهجا میشود که می توان آن را بر اساس نتایج اندازه نانوبلورها در پراش

پرتو X و همچنین تقریب جرم موثر (EMA), به افزایش اندازه نانو بلورها و نانوذرات با تابش مایکرویو و درصد ناخالصی نسبت داد.

همچنین می توان ضریب شکست را در لبه جذب، با استفاده از دادههای گاف نوری از رابطه ٤ بدست آورد [۴].  $\frac{n^2-1}{m^2+2} = 1 - (E_g/20)^{1/2}$ (٤) با توجه به اینکه  $\mathbf{z} = n^2$  است، می توان ثابت دی الکتریک را نیز در لبهی جذب محاسبه نمود. لازم به ذکر است که اندازه نانوذرات و پذیرفتاری نوری غیرخطی، دو پارامتر دیگری هستند که در این پژوهش به ترتیب با توجه به مقادیر به دست آمده E<sup>DASF</sup> و رابطه تقريب جرم مؤثر [٧] و همچنين با توجه به ملاحظات گاف انرژي و ضريب شكست نمونهها قابل محاسبه مي باشند[٨]. از تقريب جرم موثر (رابطه٥) مي توان اندازه نانوذرات را محاسبه نمود.  $E_g(nano) - E_g(bulk) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2R^2} \left(\frac{1}{m_a^*} + \frac{1}{m_a^*}\right) - \frac{1.8s^2}{sR}$ (0) در این رابطه  $\hbar$  ثابت پلانک کاهیده، R اندازه نانو ذره، **E** (bulk) مقدارگاف انرژی حالت تودهای (دارای مقدار ۲٫۷eV) [۹]، (۲٫۷eV گاف انرژی نمونههای مورد نظر حاصل از طيف UV-Vis و محاسبه شده به روش مشتق انطباق طيف جذبي، e بار الكترون، 📲 و 👫 نيز به ترتيب جرم مؤثر 🖹 الکترون و حفره میباشند. در تقریب جرم موثر اندازه نانوبلورها حدود ۱/٦ نانومتر بدست آمده است که قابل مقایسه با نتایج رابطهی شرر است که نتایج در جدول ۱ ذکر شده است. جهت برآورد پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم $(\chi^{(3)})$  طبق قاعده میلر و براساس رابطه(٦) عمل میکنیم:  $\chi^{(3)} = A(\chi^{(1)})^4 = \frac{A}{(4\pi)^4} (n_0^2 - 1)^4$ (٦)

مقدار پارامتر A توسط وانگ [۱۰] برای ترکیبات سلنیدی، مقدار پارامتر A توسط وانگ [۱۰] برای ترکیبات سلنیدی، (esu)  $A = 1/V \times 10^{-10}$  معرفی شده است. نتایج در جدول ا آمده است و نشان دهنده آن است که  $\chi^{(3)}$  با افزایش زمان تابش مایکرویو و درصد ناخالصی مس افزایش مییابد,بر اساس نتایج



χ <b>3 (×10-12)</b> ( <b>21/V2)</b> 1.894 2.006	1.872	2.006	1.924	2.286	2.421	2.529
--	-------	-------	-------	-------	-------	-------

نتيجه گيري

۱)افزایش زمان پرتودهی مایکروویو و درصد ناخالصی مس روی نانوذرات سلنیدروی باعث افزایش اندازه نانوذرات و کاهش گاف انرژی میشود.

۲)نتایج تقریب جرم موثر برای اندازه ی نانوذرات موید افزایش اندازهها با تابش مايكرويو و همچنين درصد ناخالصي مس مي-ىاشد. ۳) مقدار یارامتر χ<sup>(3)</sup> در نمونه 1.5% تحت تابش مایکرویو بالاترین مقدار را داشته و این نمونه را به عنوان گزینهی مناسبی جهت کاربردهای ایتو الکترونیک و فیبرهای نوری معرفی می کند. ٤)مقادیر پارامتر فلزیشدگی نمونه ها معرف افزایش معقول میل رسانایی نمونهها با افزایش درصد مس میباشد.

مرجعها

- [1] A. P. Alivisatos, "Semiconductor Clusters, Nanocrystals, and Quantum Dots," Science, vol. 271, pp.
- 933-937, 1996. [2] S.K.Panda , S.G.Hickey , H.V.Demir , A.
- Eychmüller", Bright White-Light Emitting Manganese and Copper Co-Doped ZnSe Ouantum Dots.
- Angewandte Chemie, vol. 50, pp. 4432-4436, 2011.
- [3] A. M. Derfus, W. C. W. Chan, S. N. Bhatia, Nano
- Lett., vol. 4, pp. 11-18, 2004.
- [4] P. Reiss, G. Quemard, S. Carayon, J. Bleuse, F. Chandezon, A. pron,
- Luminescent ZnSe nanocrystals of
- high purity, *Mater Chem. Phys.*,vol. 84, pp. 10-13, 2004. [5] K. Yadav, Y. Dwivedi, and N. Jaggi; "Structural and optical properties
- of Ni doped ZnSe nanoparticles"; Journal of Luminescence 158 (2015) 181-187.
- [5] D. Souri and Z. E. Tahan; "A new method for the determination of optical band gap and the nature of optical transitions in semiconductors"; Applied Physics B 119, no. 2 (2015) 273-279.
- [6] D. Souri, M. Mohammadi, H. Zaliani; "Effect of antimony on the optical and physical properties of Sb-V2O5-TeO2 glasses"; Electronic Materials Letters 10, no. 6 (2014) 1103-1108.
- [7] A. K. Singh, V. Viswanath, V. C. Janu; "Synthesis, effect of capping agents, structural, optical and photoluminescence properties of ZnO nanoparticles"; Journal of Luminescence 129, no. 8 (2009) 874-878.
- [8] Wang, J., Feng, H., Fan, W., Chen, K., Yang, Q. (2013). Wetchemical synthesis of and optical property ZnSe nanowires Ag 2 Se-catalyzed growth mechanism. Advances in Materials Physics and Chemistry, 2013.
- [9] Reiss, P., Quemard, G., Carayon, S., Bleuse, J., Chandezon, F., & pron, A. (2004). Luminescent ZnSe nanocrystals of high color purity; Materials Chemistry and Physics 84(1), 10-13.
- [10] Wang, C. (1970). Empirical Relation between the Linear and the Third-Order Nonlinear Optical Susceptibilities. Physical Review B, 2, 2045.

حاصل, نمونه (ZnSe:Cu (1.5% نمونه بهینه در کاربردهای ايتوالكترونيكي و انتقال سيگنال به شمار مي آيد.

همچنین در این یژوهش عامل فلزی شدگی طبق رابطه(۷) محاسبه شد و نتایج آن در جدول ۱ آمده است. با افزایش درصد ناخالصی مس, مقدار پارامتر فلزیشدگی کاهش می یابد که به معنی افزایش میل رسانایی نمونهها و نتیجهای معقول میباشد. (V)

#### $M_{criterion} = 1 - R_m / V_m$

جدول۱: نتایج خواص نوری نانوذرات سلنیدروی هم آلاییده با درصدهای مختلف ناخالصی مس و منگنز در pH=11.2 و عدم تابش امواج مایکروویو

= ZnSe pure		ZnSe pure	ZnSe:Cu(0.1%)		ZnSe:Cu(0.75%)		ZnSe:Cu(1.5%)	
MWIRT(min)	0	9	0	6	0	9	0	6
λ-1g (nm-1)	0.002917	0.002848	0.002906	0.002848	0.002883	0.002742	0.002696	0.002661
DASF Egap	3.615	3.531	3.602	3.531	3.574	3.399	3.342	3.299
n	2.248	2.267	2.251	2.267	2.257	2.297	2.310	2.320
XRD-Size	1.38	0.95	1.33	1.60	1.27	1.30	1.21	1.46
EMA-Size	1.62	1.70	1.63	1.70	1.66	1.86	1.94	2.01
М	0.425	0.420	0.424	0.420	0.422	0.412	0.408	0.406



**T<sub>3</sub> بررسی تونلزنی در شبکه T<sub>3</sub>** <sup>1</sup>رحیمی، سیما<sup>1</sup>؛ ناجی، جلیل<sup>1</sup>؛ قاسمیان، خدیجه <sup>1</sup>دانشکده علوم یایه دانشگاه ایلام، بلوار یژوهش، ایلام، ایران

### چکيده

با توجه به تحقیقات گسترده در حوزه نانو ساختارها و خواص آنها و کاربردهای وسیعی که در دنیای امروزه دارند، بررسی این ساختارها یک ضرورت تحقیقاتی را ایجاب میکند. شبکه دویعدی T<sub>3</sub> از نظر کیفی مشابه گرافن است که در سال ۲۰۱۱ میلادی ساختار این شبکه مورد بررسی قرارگرفته است. هدف ما از این تحقیق، بررسی ساختار شبکه T<sub>3</sub> و همچنین تونلزنی کلاین در آن است که این خود یک مطالعه جالب در این ساختارها است. بطوریکه میدانیم تونلزنی کلاین به بررسی اجتمال تونلزنی ذرات نسبیتی از یک سد پتانسیل میپردازد که بررسیها نشان میدهد، تونلزنی در شبکه دویعدی T<sub>3</sub> و گرافن، تفاوتهایی دارند. در اینجا احتمال تونلزنی ذرات نسبیتی از یک سد پتانسیل میپردازد که بررسیها نشان میدهد، تونلزنی در شبکه دویعدی T<sub>3</sub> و گرافن، تفاوتهایی دارند. در اینجا، احتمال عبور بررسی شده و رابطه آن بدست آمده است. مشخص شد که شبکه <sub>T</sub> به دلیل داشتن سطح انرژی تخت نسبت به گرافن برای عبور فرمیونها از سد اکتروستایک که دارای پهنای محدود در راستای محور x است، شفافتر است. واژه های کلیدی: تونل زنی، گرافن، نانوساختار، شبکه T<sub>3</sub> سد یتانسیل.

# Investigation of tunneling in the two-dimensional $T_3$ lattice

#### Rahimi, Sima<sup>1</sup>; Naji, Jalil<sup>1</sup>; Ghasemian, Khadijeh<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, University of Ilam, Ilam, Iran

#### Abstract

Considering the extensive research in the field of nanostructures and their properties and their wide applications in today's world, the investigation of these structures requires a research necessity. The twodimensional  $T_3$  lattice is qualitatively similar to graphene, and the structure of this lattice was investigated in 2011. Our goal is to consider  $T_3$  lattice and Klein tunneling of this structure which is quite interesting. As we know Klein tunneling means the tunneling of relativistic particles from the potential barrier and the studies show that Klein tunneling for graphene and  $T_3$  lattice is different. Here, the transition probability is considered and its formula is obtained. It showed, the  $T_3$  lattice due to having a flat energy level compared to graphene for the passage of fermions in the electrostatic barrier with limited length is more transparent. *Keywords*: Tunneling, Graphene, Nanostructure,  $T_3$  Lattice, Potential barrier.

تونلزنی نسبیتی در بسیاری از ساختارها بررسی شده است از جمله میتوان به مرجع (3) اشاره کرد که در آن ثابت شده است فرمیونهای دیراک در گرافن تحت تنش شدید میتوانند با احتمال بالا از سد الکتروستاتیک عبور کنند. برای مطالعه بیشتر میتوان به مرجع(4)و(5) نیز اشاره کرد.

ما به بررسی تونلزنی در شبکه  $T_3$  پرداخته و به طور خاص روی حد انرژی کم و طول موج بلند متمرکز می شویم. ابتدا به بررسی تونلزنی کلاین در گرافن می پردازیم. برطبق پارادوکس کلاین، ذرات نسبیتی می توانند به راحتی از سد پتانسیل الکترواستاتیک بزرگ عبورکنند (2,1). تاکنون تونلزنی کلاین یا

مقدمه



در تونلزنی کوانتومی نسبیتی یا کلاین، یک سد پتانسیل بزرگ برای ذرههای ورودی دافعه و برای حفرهها جاذبه ایجاد میکند. حالتهای حفرهای و حالت ذرهای در داخل و خارج از سد ایجاد میشوند که از طریق تقارن ذره–الکترون به هم متصل هستند. اما در تونلزنی غیر نسبیتی، با افزایش ارتفاع سد، احتمال تونلزنی به طور تصاعدی میرا می شود (6). اگرچه این پدیده اولین بار در سال ۱۹۲۹ توسط کلاین توصیف شد(7)، اما تحقق تجربی تونلزنی نسبيتی زمان زيادی است که ممکن شده است(7،8،9،10). چنانچه میدانیم گرافن در سال ۲۰۰٤ به صورت تجربی کشف شد (2،11) که در آن یک لایه تک اتمی از اتمهای کربن در یک شبکه لانه زنبوری چیده شدهاند. گرافن تک لایه و برانگیختگی-های کم انرژی با معادله دوبعدی دیراک بدون جرم یا همان دیراک -ويل با شبه اسپين  $\frac{1}{2} = S$  توصيف مىشوند كه اين مسئله زمينەساز آزمايش فيزيكى تونلزنى كلاين شدە است. در ادامه همین فرایند را برای شبکه مورد نظر در این مطالعه یعنی T<sub>3</sub> بررسی میکنیم(12).تغییر شبکه لانه زنبوری گرافن برای گنجاندن یک اتم اضافی در مرکز شش ضلعی های گرافن منجر به تشكيل شبكه 73 مىشود(16-13). انرژى اين شبكه با معادله ديراک–ويل با شبه اسپين 1= S توصيف می شود. طيف انرژی شبکه  $T_3$  از دو شاخه متقارن حفره–الکترون و یک سطح تخت تشکیل شده است و دارای منطقه اول بریلوین شش ضلعی است. بطور کلی شبکه  $T_3$  را می توان به عنوان دو شش وجهی در شبکه گرافن که به صورت درهم رفتهاند مشاهده کرد. می توان از معادله دیراک-ویل که برای توصیف گرافن بکار میرود، استفاده کرد اما در اینجا شبه اسپین صحیح است که خود پیامدهای قابل توجهی بر نتايج تونلزني كلاين در اين ساختار دارد كه در مرجع (12) به آن اشاره شده است. در اینجا ضمن مرور این مطالعه به ذکر نتایج بيشتر خواهيم پرداخت.

## مدل و تئوري

شبکه  $T_3$  شامل سه مکان نامتعادل یا زیر شبکه در هر سلول واحد است. چنانچه اشاره شد، طیف انرژی این شبکه از دو شاخه متقارن الکترون–حفره و یک صفحه تخت تشکیل شده است(17).

در واقع می توان آنرا یک شبکه گرافن توصیف کرد که شبه اسپین بزرگتری دارد. دو نقطه دیراک نامتعادل به نامهای 'k, k در این شبکه وجود دارد. در حد انرژیهای کم و طول موجهای بلند هامیلتونین زیر را در حضور میدان مغناطیسی و سد الکتروستاتیک برای نقطه k داریم(18):

(1) (1)  $H = v_F S.(-i\nabla) + V$  (1) در اینجا  $V_F$  سرعت فرمی است. عملگر  $\left( v_x, \partial_y \right) = \nabla$  یک عملگر در اینجا  $v_F$  سرعت فرمی است. همچنین برای سادگی در نوشتن معادله در غرنش گرفته شده است. این معادله بسیار شبیه همان معادله شبه دیراک برای گرافن است. اما تفاوت اصلی در این است که در اینجا شبه اسپین مقدار یک دارد که یادآور سه نقطه زیر شبکه بجای دو نقطه در گرافن است. هامیلتونی رابطه (1) را می توان با استفاده از معادله شرودینگر و مدل تنگبست بدست آورد. الکترون دارای بار منفی 0 > -e = P است. علاوه بر این V(x,y) نشان دارای بار منفی 0 > -e = P است. علاوه بر این (2)

. با توجه به این مقادیر سه سطح انرژی خواهیم S = (-1, 0, +1)داشت:

$$E = \pm \hbar q V_f,$$
(4)

که این سه سطح در شکل (2) نشان داده شده است. همچنین شکل (1) نشان دهنده ساختار این شبکه است. با توجه به مقدار شبه اسپین، ویژه اسپینورهای سه جزئی بصورت زیر هستند:

$$\psi(x, y) = (\psi_A(x), \psi_H(x), \psi_B(x))e^{ik_y y}$$
(5)





در ناحیه 
$$b < x$$
 امواج خروجی داریم (12):  
 $\psi_{III}(x) = t \begin{pmatrix} e^{-i\varphi} \\ \sqrt{xs} \\ e^{i\varphi} \end{pmatrix} e^{ik_x x}$  (10)  
 $\varphi = \arctan\left(\frac{k_y}{k_x}\right)$ ، ۱۰ تا مان (10)  
 $\varphi = \arctan\left(\frac{k_y}{k_x}\right)$ ، ۱۰ تا مان معادلات کا تا مان (10)  
 $\varphi = \arctan\left(\frac{k_y}{k_x}\right)$  مربوط به که terms of  $\theta$  مربوط به داخل سد است. سد پتانسیل مولفه X بردار موج  $(q_x, k_y) = q$  را جهت بردا های موج خروجی و ورودی است و  $\theta$  مربوط به داخل سد است. سد پتانسیل مولفه X بردار موج  $(x, k_y) = q$  را ورود  $(q_x, k_y) = q_x = \sqrt{(E - V_0)^2 - k_y^2}$  با زاویه  $x = d = \arctan\left(\frac{k_y}{q_x}\right)$   
 $g = \operatorname{sign}(E) = +1,$   
 $\int_{y_{yy}} e^{-i\varphi} e^{-i\varphi} e^{-i\varphi} e^{-i\varphi} e^{-i\varphi}$  در ادامه شرط  $(q_x, k_y) = e^{-i\varphi} e^{-i\varphi}$  در ادامه شرط  $(x, k_y) = e^{-i\varphi}$ . در ادامه شرط  $(x, k_y) = e^{-i\varphi}$  در ادامه مرط  $(x, k_y) = e^{-i\varphi}$ 

$$T_{T_{\tau}} = \left| t \right|^{\tau} = \frac{\left(\frac{\cos \varphi}{\cos \theta}\right)^{\tau}}{\left(\frac{\cos \varphi}{\cos \theta}\right)^{\tau} + \frac{1}{\epsilon} \left(1 - \left(\frac{\cos \varphi}{\cos \theta}\right)^{\tau}\right)^{\tau} \sin n^{\tau} \left(qd\right)}$$
(11)  
(c. livi) avalelle  $S = 1$  yeton livies independent of the second seco

نتيجه گيري

چند نمونه از تفاوتهای مهم تونلزنی در شبکه  $T_3$  و در گرافن به شرح زیر است: مورد اول بیان میکند که سدهای الکترواستاتیک در  $T_3$  بسیار شفافتر از گرافن هستند. دوم اینکه در روش تونلزنی کلاین، زاویه برخورد مهم نیست و تونلزنی، با یک احتمال عبور کامل انجام میشود. یک تفاوت دیگر این است که عبور از مانع در شبکه  $T_3$  در انرژی های کم با گرافن تفاوت دارد. بطور کلی می توان نتیجه گرفت که شبکههایی با شبه اسپین صحيح احتمال تونلزني بالاترى نسبت به مقادير نيمه صحيح شبه اسپین دارند. این موارد در شکلهای (4) و (5) نشان داده شده است.



شكل1 : شبكه  $T_3$  و سلول واحد أن نشان داده شده است(23).

یک سد الکتروستاتیک را همانند شکل(3) در نظر می گیریم:

$$V(x,y) = V_{.}\Theta(x)\Theta(d-x)$$
(6)  

$$\sum_{0} \Theta(x) = V_{.}\Theta(x) = V_{0} = V_$$

$$\psi(x)e^{ik_y}$$



با بردار موج  $k_y$  . برای صفحه x امواج ورودی و خروجی را در x <0 مى توان نوشت(12):

$$\psi_{I}(x) = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi} \\ \sqrt{\gamma}s \\ e^{i\varphi} \end{pmatrix} e^{ik_{x}x} + r \begin{pmatrix} e^{i\varphi} \\ -\sqrt{\gamma}s \\ e^{-i\varphi} \end{pmatrix} e^{-ik_{x}x}$$
(8)

که ۲ دامنه بازتاب است. تابع موج داخل سد یا  $d \leq x \leq d$  در حضور سد الكتروستاتيك به شكل زير است(12):

$$\psi_{II}(x) = a \begin{pmatrix} e^{-i\theta} \\ \sqrt{\gamma}s \\ e^{i\theta} \end{pmatrix} e^{iq_x x} + b \begin{pmatrix} e^{i\theta} \\ -\sqrt{\gamma}s \\ e^{-i\theta} \end{pmatrix} e^{-iq_x x}$$
(9)





[4] Illes, E., and E. J. Nicol. "Klein tunneling in the  $\alpha$ - T 3 model." *Physical Review B* 95.23 (2017): 235432.

[5] Iurov, A., Zhemchuzhna, L., Fekete, P., Gumbs, G., & Huang, D. (2020). Klein tunneling of optically tunable Dirac particles with elliptical dispersions. *Physical Review Research*, *2*(4), 043245.

[6] Griffiths, D. J. (2004). The adiabatic approximation. *Introduction to Quantum Mechanics, 2nd ed.; Pearson Prentice Hall: Upper Saddle River, NJ, USA*, 371-396.

[7] Young, A. F., & Kim, P. (2009). Quantum interference and Klein tunnelling in graphene heterojunctions. *Nature Physics*, 5(3), 222-226.
[8] Stander, N., Huard, B., & Goldhaber-Gordon, D. (2009). Evidence for Klein tunneling in graphene p-n junctions. *Physical review letters*, 102(2), 026807.

[9] Gorbachev, R. V., Mayorov, A. S., Savchenko, A. K., Horsell, D. W., & Guinea, F. (2008). Conductance of pnp graphene structures with "airbridge" *top gates. Nano letters*, 8(7), 1995-1999.

[10] Vidal, J., Mosseri, R., & Douçot, B. (1998). Aharonov-Bohm cages in two-dimensional structures. *Physical review letters*, 81(26), 5888.

[11] Vidal, Julien, Gilles Montambaux, and Benoît Douçot. "Transmission through quantum networks." *Physical Review* B 62.24 (2000): R16294.
[12] Urban, D. F., Bercioux, D., Wimmer, M., & Häusler, W. (2011). Barrier transmission of Dirac-like pseudospin-one particles. *Physical Review B*, 84(11), 115136.

[13] Dóra, B., Kailasvuori, J., & Moessner, R. (2011). Lattice generalization of the Dirac equation to general spin and the role of the flat band. *Physical Review* B, 84(19), 195422.

[14] Malcolm, J. D., & Nicol, E. J. (2014). Magneto-optics of general pseudospin-s two-dimensional Dirac-Weyl fermions. *Physical Review* B, 90(3), 035405.

[15] Jaillon, O., Bouhouche, K., Gout, J. F., Aury, J. M., Noel, B., Saudemont, B., ... & Meyer, E. (2008). Translational control of intron splicing in eukaryotes. Nature, 451(7176), 359-362.

[16] Bercioux, D., Urban, D. F., Grabert, H., & Häusler, W. (2009). Massless Dirac-Weyl fermions in a T 3 optical lattice. *Physical Review* A, 80(6), 063603.

[17] Greiner, Walter, Berndt Müller, and Johann Rafelski. "*Evolution of the Vacuum State in Supercritical Potentials.*" Quantum Electrodynamics of Strong Fields. Springer, Berlin, Heidelberg, 1985. 257-299.

[18] Neto, A. C., Guinea, F., Peres, N. M., Novoselov, K. S., & Geim, A. K. (2009). The electronic properties of graphene. Reviews of *modern physics*, 81(1), 109.

[19] GRIB, A. A.; MAMAYEV, S. G.; MOSTEPANENKO, V. M. Vacuum Quantum Effects in Strong Fields, Friedmann Lab. Publishing, St. Petersburg, 1994.

[20] Ando, T., Nakanishi, T., & Saito, R. (1998). Berry's phase and absence of back scattering in carbon nanotubes. *Journal of the Physical Society of Japan*, 67(8), 2857-2862.

[21] McEuen, P. L., Bockrath, M., Cobden, D. H., Yoon, Y. G., & Louie, S. G. (1999). Disorder, pseudospins, and backscattering in carbon nanotubes. *Physical Review* Letters, 83(24), 5098.

[22] Katsnelson, M. I. "Zitterbewegung, chirality, and minimal conductivity in graphene." The European Physical Journal B-Condensed

*Matter and Complex Systems* 51.2 (2006): 157-160. [23] Yang, X., & Nayak, C. (2002). Electrical and thermal transport by

nodal quasiparticles in the d-density-wave state. *Physical Review* B, 65(6), 064523.



شكل3: سد پتانسيل الكتروستاتيك و سه ناحيه تونلزني نشان داده شده است(12).



شکل 4: احتمال عبور برای شبکه  $T_3$  بر حسب زاویه فرودی و برای مقادیر شکل 4: احتمال عبور برای شبکه  $E_3$  برنگ سبز وE=240 رنگ سبز وE=240 رنگ نارنجی رسم شده است(12).



شکل 5: احتمال عبور برای شبکه  $T_3$  بر حسب زاویه فرودی و برای مقادیر E= 380 بنگ آبی روشن، E= 360 رنگ زرد، E= 380 E= 480  ${
m E}=480$ 

# مرجعها

[1] Ludwig, A. W., Fisher, M. P., Shankar, R., & Grinstein, G. (1994). Integer quantum Hall transition: An alternative approach and exact results. *Physical Review* B, 50(11), 7526.

[2] Huard, B., Sulpizio, J. A., Stander, N., Todd, K., Yang, B., & Goldhaber-Gordon, D. (2007). Transport measurements across a tunable potential barrier in graphene. *Physical review letters*, *98*(23), 236803.
[3] Ghasemian, K., Setare, M. R., Jahani, D., & Naji, J. (2022). Klein tunneling of semi-Dirac-like fermions in graphene. *Europhysics Letters*, *136*(1), 17005.



# $AgGaS_2$ طيف اتلاف انرژی الکترون نزديک ساختار لبههای K و K سولفور در کالکوپيريت

**نجاتی پور، ریحان، دادستانی، مهرداد** گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه لرستان، خرم آباد، لرستان، ایران

## چکیدہ

در چارچوب نظریهی تابعی چگالی (DFT)، با استفاده از پایههای موج تخت به ساختهی خطی (LAPW) و روش پتانسیل کامل، طیف اتلاف انرژی نزدیک ساختار لبههای (ELNES) K و L سولفور در کالکوپیریت AgGaS2 محاسبه و با نتایج تحربی موجود مقایسه می شود. منشأ بیشینه های طیفی با استفاده از تحلیل چگالی حالتهای الکترونی اشغالنشده و نیز تجزیهی طیفهای ۱۶ و ۲۵ مشخص می گردد. شکافتگی انرژی بین بیشینه های ساختاری در ابتدای طیف اتلاف لبهی K سولفور ناشی از پیوند کووالانسی بین اتم سولفور و اتمهای نقره و گالیوم با طولهای پیوندی متفاوت است. طیف اتلاف لبهی L سولفور به حالتهای اشغالنشده یالای تراز فرمی با مشخصهای اوربیتالی ۶ و ۲۵ میب داد.

واژه های کلیدی: کالکوپیریت AgGaS<sub>2</sub>، طیف اتلاف انرژی، تقریب حفره-مغزه، نظریهی تابعی چگالی (DFT).

# Electron energy loss spectrum near the sulfur K and L edge structures in AgGaS<sub>2</sub> chalcopyrite

#### Nejatipour, Reihan; Dadsetani, Mehrdad

Department of Physics, Faculty of Sciences, Lorestan University, Khoramabad, Lorestan, Iran

#### Abstract

In the framework of the density functional theory (DFT), the energy loss spectra near the sulfur K and L edge structures in  $AgGaS_2$  are studied by means of the linearized augmented plane wave (LAPW) basis set and full potential method, and are compared with the existing experimental results. The origins of the spectral structures are determined by means of the analysis of the unoccupied densities of states and the spectral decompositions of 1s and 2p spectra. The energy splitting between the spectral features at the edge onset of sulfur K edge is originated from the covalent bonding between the sulfur atom with the silver and gallium atoms with the different bond lengths. The sulfur L edge spectrum can be attributed to the electron transition to the unoccupied states above the Fermi level with the s and d orbital characteristics.

*Keywords*:  $AgGaS_2$  chalcopyrite, energy loss spectrum, core-hole approximation, Density functional theory (DFT).

PACS No. 71, 78.

بهدلیل خاصیت ناهمسانگردی، پیش بینی می شود که این ترکیبات موادی دوشکستی بوده و در اپتیک غیرخطی کاربرد داشته باشند. بهعلاوه، طولعمری پنجاه برابر سلولهای خورشیدی سیلیکونی، نویدبخش کارآمدی بالای کالکوپیریتها در صنعت سلولهای خورشیدی است. از منظر اپتیکی، خواص کالکوپیریتهای برپایهی نقره مورد مطالعات آزمایشگاهی و نظری بوده است [۲]، اما خواص

مقدمه

کالکوپیریتها، ترکیبات سهتایی متشکل از عناصر ۲۰II-IV نیم رساناهایی با کاربردهای فراوان در دستگاههای اپتوالکترونی، فوتوولتایی، و اپتیک غیرخطی هستند. گسترهی عظیم کاربردهای الکترونی و نوری، این دسته از مواد را موضوع تعداد زیادی از اندازه گیریهای آزمایشگاهی و محاسبات پیشرفته نموده است [۱].



الکترونی این دسته از کالکوپیریتها از روشهای طیفسنجی کمتر مورد مطالعه قرار گرفتهاست. مطالعهی حاضر به بررسی ویژگیهای ساختاری و الکترونی AgGaS2 در چارچوب نظریهی تابعی چگالی ۱۳] میپردازد. طیف اتلاف انرژی مغزه (ELNES) برای لبههای ۱۶ و ۲۲ اتم سولفور مطالعه و منشأ ساختارهای طیفی آن تحلیل می گردد.

# روش محاسبات

محاسبات حاضر در چارچوب نظریهی تابعی چگالی (DFT) بر پایه روش موج تخت به ساخته خطی با پتانسیل کامل (FPLAPW)، اعمال شده در کد WIEN2k [٤] است. تابعی تبادلی – همبستگی از روش تقریب چگالی موضعی (LDA)، با استفاده از تابعی پردو و وانگ [٥] محاسبه شده است. پارامتر RMTKMax برابر با ۷ منجر به همگرایی خواص و طیفهای محاسباتی می شود. بیشینه عدد کوانتومی ا برای بسط توابع موج درون کره های اتمی و RM، بیشینه بردار در فضای وارون برای بسط پتانسیل به ترتیب ۱۰ و ۱۲ واحد تنظیم شده اند. انتگرال گیری های ناحیه اول بریلوئن با استفاده از روش تتراهدرون با ۲۶ نقطه k در ناحیه کاهش ناپذیر صورت می گیرد.

در روش ساختار نواری، از تقریب اول بور، سطح مقطع دیفرانسیلی پراکندگی برای پراکندگی ناکشسان الکترون با معادله (۱) داده می شود [7]:

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial \mathbf{E}}(\mathbf{E}, q) = \left[\frac{4\gamma^2}{a_0^2 q^4}\right] \frac{k_f}{k_i} \sum_{i, f} \left| \left\langle f \right| e^{iq \cdot r} \left| i \right\rangle \right|^2 \delta(\mathbf{E} - \mathbf{E}_f - \mathbf{E}_i)$$
(1)

که q تکانه انتقالی، a0 شعاع بوهر، E اتلاف انرژی و γ عامل نسبیتی است. جمع روی حالتهای تکالکترونی اشغال شده اولیه و اشغال نشدهی نهایی انجام می گیرد. از آنجایی که حفره برجای مانده از برانگیختگی الکترون، بطور موضعی پتانسیل را تغییر می دهد، چگالی حالتهای تصویر شده تغییر کرده و درنتیجه شکل کلی طیف اصلاح می شود. بنابراین، استفاده از تقریب حفره-مغزه به منظور حصول طیف اتلاف ضروری است. برای اجتناب از برهم کنش حفره-مغزههای مجاور، از ابریاخته ۲×۲×۲ استفاده کردیم.

نتايج و بحث

 $I\overline{4}2d$  مساختار بلوری AgGaS2 را در تقارن چهارگوشی  $I\overline{4}2d$  نمایش می دهد. یاخته یواحد آن شامل دو اتم نقره، دو اتم گالیوم و چهار اتم سولفور است که در شبکه ی با ابعاد  $\pi = 6^{-0}/7$  و  $g = \varphi = 0/7$  بایرد و چهار اتم سولفور است که در شبکه ی با ابعاد  $\pi = 6^{-0}/7$  و  $g = \varphi = 0/7$  مسلمان و زوایای ساختاری  $\pi = 6^{-0}/7$  بلوری شده اند. مقادیر محاسبه شده برای ثابته ای شبکه در مقاله ی حاضر شده اند. مقادیر محاسبه شده برای ثابته ای شبکه در مقاله ی حاضر  $\pi = 6^{-0}/7$  و  $\pi = 6^{-0}/7$  مسلماند. مقادیر محاسبه شده برای ثابته ای شبکه در مقاله ی حاضر شده اند. مقادیر محاسبه شده برای ثابته ای شبکه در مقاله ی حاضر  $4^{-0}/7$  و  $7^{-0}/7$  در مرکز در مرکز در موافق با دیگر نتایج موجود است [ $7 e^{-1}$ ]. کاتیونه ای  $-26^{-0}$  و  $4^{-0}/7$  در مرکز  $6^{-0}/7$  در گوشه های چهاروجهی و آنیونه ای  $-27^{-0}/7$  و  $7^{-0}/7$  و  $7^$ 



شکل ۱. بلور AgGaS2 در نماهای (a) بالا و (b) جانبی. کرههای آبی، قرمز، و زرد بهترتیب اتمهای نقره، گالیوم و سولفور هستند.

در شکل ۲، ساختار نواری بلور AgGaS2 نمایش داده شده است. این ترکیب نیمرسانایی با گاف الکترونی ۹۶/۰۰ بصورت مستقیم در Γ است که نتیجهی حاضر در توافق با نتایج محاسباتی موجود است [۲و۷].



شکل ۲. ساختار نواری (چپ) و چگالی حالتهای (راست) الکترونی بلور AgGaS2. صفر انرژی متناظر با تراز فرمی است.

در ادامه، با استفاده از باریکه تکرنگ و پرانرژی الکترونی با انرژی ۳۰۰ keV، اتلاف انرژی لبه K سولفور در AgGaS2 محاسبه گردید. نیمزاویههای همگرایی و جمعکننده در مقدار magic بترتیب ۱/۸۷ و ٥/٥ ميلى راديان انتخاب شدند. شكل ٣، طيف ELNES لبه K سولفور را در بلور AgGaS2 در مقایسه با طیف تجربی متناظر [۸] نشان می دهد. ساختارهای طیفی اصلی از a تا g نامگذاری شدهاند. برای تحلیل منشأ این ساختارهای طیفی از دو ابزار استفاده شده است: چگالی حالتهای الکترونی (شکل ٤) و تجزیهی طیفی لبهی K سولفور (شکل ٥). مطابق با تقریب دوقطبی، نوارهای مجاز برای انتقال الکترون از حالتی با تقارن s، نوارهای رسانش اشغالنشده با مشخصهی اربیتالی p هستند. بعلاوه، اگر حالتهای اولیه و نهایی ازنظر فضايي هميوشاني داشته باشند، انتقال الكتروني رخ خواهد داد؛ از آنجایی که حالت ۱۶ در اتم هدف بشدت موضعی است، انتظار می رود که الکترون ها غالباً به حالت های اشغال نشده ی خود اتم برانگیخته انتقال یابند. بنابراین طیف اتلاف لبهی K سولفور متناظر با حالتهای p اتم سولفور است.



شکل ۳. طیف اتلاف انرژی نزدیک ساختار لبهی K سولفور در بلور AgGaS<sub>2</sub>: (a) محاسبات حاضر، (b) تجربی [۸].

شکافتگی انرژی بین بیشینههای a و b به موقعیت اتم سولفور در بلور مرتبط است. این اتم با سه اتم گالیوم و یک اتم نقره بصورت چهاروجهی همسایه است، اولی در ۲/۳۱ و دومی در ۲/۵۵ آنگستروم. بعلاوه سهمی از این شکافتگی مربوط به ترکیب اربیتالی

a و Ga-S و Ga-S است. همانطور که شکل ٤ تایید می کند، بیشینهی a در انرژی Ga-S است. همانطور که شکل ٤ تایید می کند، بیشینهی از p با در انرژی V· eV ناشی از انتقال الکترونی به حالتهایی از p در انرژی V۵ eV عمدتاً ناشی از انتقال الکترونی به حالتهایی از p با مشخصهی عمود بر صفحه، pz است، هرچند که سهم حالات به مهر یز در این انرژی چشم گیر است.



شکل ٤. چگالی حالتهای p اتم سولفور در بلور AgGaS2.

شکل ۵ داده های حاصل از تحلیل چگالی حالت های الکترونی را تایید می کند. بیشینه ی طیفی اول در لبه ی K سولفور بیشتر حاصل انتقال الکترونی به حالت های با تقارن  $\sigma$  است. بیشینه های دوم و سوم که در شکل ۵ با خطچین قرمز مشخص شده است، متناظر با ساختار طیفی پهن d هستند و مؤید انتقال الکترونی از اوربیتال ۱۶ اتم سولفور به حالت های با تقارن  $\pi$  است. ساختار c حاصل هیبریدی از حالات  $\pi$  و  $\sigma$  است، در حالیکه برای ساختار طیفی موسوم به b در تایید یافته های حاصل از چگالی حالات، سهم  $\sigma$  سهم غالب در انتقال الکترونی است. ساختارهای طیفی f و g نیز به ترتیب حاصل انتقال الکترونی به حالات اشغال نشده ی  $\sigma$  و  $\pi$  می باشند.



شکل ۵. تجزیهی طیفی اتلاف انرژی لبهی K سولفور در بلور AgGaS<sub>2</sub> به حالتهای *π* و 5.

در ادامه، طیف اتلاف مغزه برای لبهی L اتم سولفور در شکل ۲ نشان داده شده است. این طیف متناظر با انتقال الکترون از تراز ۲p اتم سولفور به حالتهای اشغالنشدهی بالای تراز فرمی است. طیف اتلاف لبهی L اتم سولفور دارای ۲ بیشینهی طیفی اصلی است که در شکل ۲ از a تا f نامگذاری شدهاند. دو ساختار نسبتاً تیز a و d با یک ساختار پهن c دنبال می شوند و در ادامه افزایشی قابل توجه در طیف اتلاف به بیشینهی d منتهی می گردد. در ادامه رفتاری کاهشی در طیف اتلاف قابل مشاهده است که با ساختارهای پهن به شدتهای صفر نزدیک می شود.



شکل ٦. طيف اتلاف انرژي نزديک ساختار لبهي L سولفور در بلور AgGaS2

مطابق با قانون انتقال دوقطبی، الکترون تراز ۲p مجاز به انتقال به حالتهایی با تقارنهای s و b است. تجزیه ی طیفی لبه ی L (شکل ۷) نشان می دهد که منشأ این ساختارهای طیفی متنوع است. دو ساختار طیفی a و b به ترتیب در انرژیهای ۱/۹ و ۷۳ ۲٫۳، حاصل انتقال الکترونی از اربیتال ۲p اتم سولفور به حالتهای بالای تراز فرمی با تقارن s است. ساختار طیفی c در انرژی ۷۹ ۰٫۰ ناشی از انتقال الکترون به اوربیتالهای اشغالنشده ی b با اعداد کوانتومی می توان به انتقال الکترونی به حالات b با تقارن ۶٫۰ حال می توان به انتقال الکترونی به حالات b با تقارن ۱٫۰ حال می توان به انتقال الکترونی به حالات b با تقارن ۱٫۰ حال می توان به انتقال الکترونی به حالات b با تقارن ۱٫۰ مرتبط دانست، اگرچه سهم حالتهای دیگر نیز غیرصفر است. به همین ترتیب، سهم انتقالات در بیشینه های طیفی e f به ترتیب حالتهای b با تقارنهای ۱٫۰ حالتهای ساختارهای طیفی بالاتر از Ve ۵ دارای h با تقارنهای ۱٫۰ حالتهای ساختارهای طیفی بالاتر از Ve ۵ دارای سهمی مساوی با ۱٫۰ حالتهای منخارهای طیفی بالاتر از Ve ۵ دارای اشاره شده، هیبریداسیون بین حالتهای مذکور با حالت ۲٫۲

قابل توجه است. در مقابل، حالتهای s تنها برای بیشینههای طیفی در انرژیهای زیر eV ی سهیم هستند.



شکل ۷. تجزیهی طیفی اتلاف انرژی لبهی L سولفور در بلور AgGaS<sub>2</sub> به حالتهایی با اعداد کوانتومی l و m.

# نتيجه گيري

مرجعها

مطالععی حاضر به بررسی طیفهای اتلاف انرژی نزدیک ساختار لبه K و L سولفور در کالکوپیریت AgGaS2 میپردازد. منشأ بیشینههای طیفی در لبهی K سولفور انتقال الکترونی به حالات با تقارن  $\pi$  و  $\sigma$  است. شکافتگی انرژی بین بیشینههای ساختاری در آستانهی طیف لبهی K سولفور حاصل از طولهای پیوندی متفاوت بین اتم سولفور با اتمهای نقره و گالیوم است. در طیف اتلاف لبهی L سولفور، سهم حالات با تقارن S (b)تنها برای بیشینههای حاضر در انرژیهای کمتر (بیشتر) از eV قابل توجه است.

- [1] H. Yanagi, et al., 'Chemical Design and Thin Film Preparation of p-
- Type Conductive Transparent Oxides', J. Electroceram. 4 (2000) 407.
  [Y] X. Huang, et al., 'A density functional study of the structural, electronic, optical and lattice dynamical properties of AgGaS<sub>2</sub>', Results in Phys. 35 (2022) 105309
- [٣] P. Hohenberg and W. Kohn, 'Inhomogeneous Electron Gas', Phys. Rev. B 136 (1964) B864
- [¥] P. Blaha, et al. 'WIEN2k: An APW+lo program for calculating the properties of solids', J. Chem. Phys. 152 (2020) 074101.
- [] J. P. Perdew, Y. Wang, 'Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy', Phys. Rev. B 45 (1992) 13244.
- [1] H.A. Bethe, 'Zur Theorie des Durchgangs schneller Korpuskularstrahlen durch Materie', Ann. Phys. 5 (1930) 325.
- [v] A. Chahed, et al., 'First-principles calculations of the structural, electronic and optical properties of AgGaS2 \$ AgGaSe2', Physica B 367 (2005) 142.
- [A] A.A. Lavrentyev, et al., 'Experimental and theoretical X-ray K-spectra of sulfur of zincblende-based compounds AgGaS<sub>2</sub>-CdGa<sub>2</sub>S<sub>4</sub>-InPS<sub>4</sub>', J. Phys. Chem. Solids 63 (2002) 227.





# خواص الکترونی عایقهای توپولوژیکی مغناطیسی در حضور اثر وارپینگ شش ضلعی و نور

### قطبيده دايروى

**عبدی، ریحانه<sup>۱</sup>؛ فرقدان، روح ا...<sup>۲</sup>** <sup>ا</sup>دانشکده فیزیک دانشگاه کاشان، بلوار قطب راوندی، کاشان ۲ گروه فیزیک ماده چگال، دانشگاه کاشان، کاشان

چکیدہ

در این مقاله برهمکنش فرمیون های دیراک روی سطح عایق توپولوژیک در حضور اتصالات مغناطیسی، اثر وارپینگ شش ضلعی و هم چنین تابش نور با قطبش دایروی بررسی می شود. با تغییر در شدت نور فرودی و جهت گیری مغناطش اعمال شده می توان خواص ترابردی عایق را از جمله رسانایی و گاف انرژی تغییر داد. استفاده از این نتایج می تواند برای بهبود خواص این نوع عایق ها و استفاده در ابزارهای اپتو-اسپیترونیکی مفیاد واقع شود. **واژه های کلیدی:** عایق توپولوژیک، نور قطبیده دایروی، اثر وارپینگ، اتصالات فرومغناطیس

# Transmission properties of magnetized topological insulators in the presence of hexagonal warping effect and circularly polarized light. Abdi, Reyhane<sup>1</sup>; Farghadan, Rouhollah<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, University of Kashan, Kashan, <sup>2</sup>Condensed Matter Physics, University of Kashan, Kashan,

#### Abstract

In this article, the interaction of Dirac fermions on the surface of topological insulators in the presence of magnetic junctions, the effect of hexagonal warping, and the radiation of light with circular polarization are investigated. By changing the intensity of the incident light and the orientation of the magnetization, the transport properties of the insulators can be changed, such as conductivity and the energy gap. The use of these results can be useful for improving the properties of this type of insulators in opto-spintronic devices. **Keywords:** topological insulator, circularly polarized light, warping effect, ferromagnetic junctions.

PACS No. 70-72

ترکیبات بر مبنای بیسموت مثل Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> تنها یک نقطه دیراک در سطح خود دارند. این ویژگی موجب جالب توجه بودن ویژگی های چنین عایق هایی در زمینه های مختلف از جمله رسانش گرمایی عایق و ابزارهای ترموالکتریکی شده است. هم چنین مطالعاتی در زمینه اپتو-اسپینترونیک و کنترل قطبش اسپینی با استفاده از عایق های توپولوژیک انجام گرفته است [۲]. از سوی دیگر اعمال میدان های الکتریکی و مغناطیسی خارجی منجر به اثرات جالبی بر رفتار فرمیون های دیراک در سطح عایق می شود.

مقدمه

عایقهای توپولوژیک در مقایسه با عایقهای معمولی دارای گاف-های نواری بزرگ و حالتهای رسانایی در سطح و لبههای عایق هستند. همچنین به دلیل ویژگیهایی از جمله قابل توجه بودن برهم-کنش اسپین-مدار و تقارن بازتاب زمانی، اثر وارپینگ شش ضلعی در سطح این نوع عایقها ایجاد میشود. حالتهای سطحی در نزدیکی انرژی فرمی می توانند خواص الکترونیکی این مواد را تحت تاثیر قرار دهند، بنابراین اثر وارپینگ بر ترابرد الکترونی در سطح عایق موثر خواهد بود [1].





شکل۲.الف) نمایشی از مخروط دیراک فرمیونها روی سطح عایق توپولوژیک سه بعدی، ب) نمایش تقاطع مخروط دیراک با انرژی ثابت E=400meV در غیاب اثر مغناطش و تابش نور.

است که با توجه به این شرط حداقل بسامد لازم برای نور قابل محاسبه است [٥،٦] . همچنین محاسبات در محدوده شدتهای پایین نور ۱ >> A انجام شده است [٥،٦،٧]. برای نور لیزرها و پالسهای درمحدودهی بسامد ۱۰۰۰تراهرتز شدت نور کوچکتر از یک میباشد [۲،۷] . با اعمال این دو شرط مرتبه بزرگی بسامد نور تابیده که به صورت غیررزونانسی در نظر گرفته شده است برای هر ساختاری بدست می آید.

رابطه پراکندگی انرژی برای هامیلتونی فوق در حضور تمام برهم-کنش ها به صورت زیر است:

$$E(k) = Ug + s\varepsilon(k) \tag{2}$$

که در این رابطه s نمایه اسپین و:

 $\varepsilon(k) = \sqrt{\left[\lambda(k_x^3 - 3k_x k_y^2) + \Delta\cos\theta + \eta\lambda_{\Omega}\right]^2 + C}$  $C = (\Delta\sin\theta\cos\varphi - v_F k_y)^2 + (\Delta\sin\theta\sin\varphi + v_F k_x)^2$ 



 ۱. طرحی از ساختار مورد بررسی شامل عایق توپولوژیک، اتصالات مغناطیسی، نور و ولتاژ گیت

با افزودن تابش نور قطبیده بر سطح عایق می توان خواص الکترونی و وابسته به اسپین این مواد را دستخوش تغییر ساخت و ترابرد وابسته به اسپین-دره را در عایقهای توپولوژیک دارای اتصالات فرومغناطیس، ولتاژگیت و سایر برهمکنش های خارجی در حضور نور بررسی کرد [۳و٤]. در این مقاله به بررسی برخی خواص عایق تویولوژیک Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> در

حضور مغناطش و تابش نور قطبیده بدون تشدید می پردازیم. حضور مغناطش و تابش نور قطبیده بدون تشدید می پردازیم. هامیلتونی موثر ساختار در حضور مغناطش و تحت تابش نور به فرم زیر است[۱]:

 $H = v_F(k_x\sigma_y - k_y\sigma_x) + \lambda(k_x^3 - 3k_xk_y^2)\sigma_z + V(x) \quad (1)$   $E = v_F(k_x\sigma_y - k_y\sigma_x) + \lambda(k_x^3 - 3k_xk_y^2)\sigma_z + V(x) \quad (1)$ 

 $V(x) = Ug + \Delta m.\sigma + \eta \lambda_{\Omega} \sigma_{z} \tag{(7)}$ 

در رابطه فوق  $\nabla_F$  سرعت فرمی،  $\lambda$  پارامتر وارپینگ،  $\sigma$  ماتریس های پاؤولی Ug،  $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  ولتاژ گیت و m مغناطش اعمال شده است که می تواند به صورت زیر جهت گیری داشته باشد:

 $m = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$  (۳)  $me_{0} = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$  (۳)  $me_{0} = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$   $me_{0} = me_{0} + (e_{0} + 1) + me_{0} + (e_{0} + 1)$   $me_{0} = \frac{1}{2}(eAv_{F})^{2}/\hbar\Omega$  n = 1n = 1









شــکـل۳.الف) نمایشــی از مخروط دیراک فرمیونهـا روی ســطح عایق توپولوژیـک ســه بعـدی، ب) نمایش تقاطع مخروط دیراک با انرژی ثابت E=400meV. رنگ آبی در حضـور اثر نور و مغناطش در راستای x و رنگ سبز در غیاب اثر نور و مغناطش.

شکل ۱ ساختار مورد بررسی را نمایش میدهد که در آن عایق توپولوژیک در حضور نور و مغناطش قرار گرفته است. طبق تعریف جهتگیری مغناطش می تواند در راستای X، Y و یا Z باشد که در این مقاله مغناطش در راستای X و Y در حضور نور قطبیده در در جهت Z بررسی می شود.

در شکل ۱ نمودار مربوط به انرژی در حالت دو بعدی و سه بعدی بدون حضور اثر مغناطش و تابش نور نمایش داده شده است. شکل ۱ الف مخروط دیراک فرمیونهای روی سطح عایق را نشان میدهد که با توجه به روابط ٤تا٦ محاسبه شده است. گاف انرژی در این حالت مطابق با صفر بوده و نمودار انرژی به ازای اسپین بالا (منحنی آبی) و پایین (منحنی قرمز) متقاطع هستند. شکل ۱ ب نیز نشان



شکل ٤.الف) نمایشی از مخروط دیراک فرمیون ها روی سطح عایق توپولوژیک سه بعدی، ب) نمایش تقاطع مخروط دیراک با انرژی ثابت E=400meV. رنگ آبی در حضور اثر نور و مغناطش در راستای ۷ و رنگ سبز در غیاب اثر نور و مغناطش.

میدهد که در غیاب اثر برهمکنشهای خارجی، لبه های مخروط دیراک به ازای مقدار ثابت انرژی E=400meV تا حد زیادی متقارن بوده و نقطه Γ در مرکز منحنی واقع شده است. شکل گیری لبههای مخروط دیراک به صورت دانه برف که در شکل ب رسم شده است از اثر وارپینگ شش ضلعی ناشی میشود و با تغییر مقدار پارامتر وارپینگ عایق قابل تنطیم میباشد.

در شکلهای ۳ و ٤ روابط انرژی در حضور تابش نور و مغناطش در راستاهای X و Y بررسی شده است. برای اعمال اثر تابش نور در محاسبات مقدار پارامتر  $\lambda_{\Omega}=100$ meV فرض شده و هم چنین محاسبات به ازای 1+= $\eta$  و برای نور با قطبش راستگرد انجام شده است. در شکل ۳ اثر مغناطش در راستای X اعمال شده که به معنای در نظر گرفتن زوایای بردار مغناطش m به صورت  $\theta=\theta=0$  و

بوده ولی در شکل ٤ مغناطش در راستای y تعریف شده و مقادیر  $\theta = \phi = \pi/r$  میباشد. مقدار انرژی تبادلی ناشی از اثر مغناطش نیز برابر با  $\Delta = 70$  در نظر گرفته شده است. شکل ۳ و ٤ الف و ب نشان میدهد که با اعمال اثر بردار نور و مغناطش در مخروط دیراک فرمیونها در مقایسه با شکل ۲ الف گاف انرژی قابل توجهی بین انرژی اسپین بالا و پایین ایجاد میشود. مقدار این گاف برای شکل ۳ الف با مغناطش در راستای x برابر با ۹۵/۷ میباشد، شکل ٤ الف با مغناطش در راستای y برابر با ۹۵/۲ meV میباشد، که نشان میدهد گاف انرژی ایجاد شده با اعمال مغناطش در راستای که نشان میدهد گاف انرژی ایجاد شده با اعمال مغناطش در راستای

در شکل ۳ و ٤ ب که تقاطع لبههای مخروط دیراک را با انرژی E=400meV نمایش میدهد خطوط منحنی در غیاب (سبز رنگ) و حضور (آبی رنگ) اثر تابش نور و مغناطش رسم شده است. شکل ۳ ب نشان میدهد با اثر تابش نور و مغناطش در راستای x تقارن لبههای مخروطی دیراک از بین رفته و منحنی به سمت بالا جابجا می شود.

شکل ٤ ب که تقاطع منحنی مخروطی با انرژی ثابت E=400meV را در حضور نور و مغناطش در راستای y نمایش میدهد نیز بیانگر تغییر شکل در حالت دانه برفی و تقارن اثر وارپینگ با اعمال سایر برهمکنشهای خارجی است. در این حالت علاوه بر شکسته شدن تقارن نمودار، منحنی به سمت چپ منتقل شده است.

در صورتی که اثر مغناطش در راستای Z نیز اعمال شود اثری مشابه با اثر تابش نور خواهد داشت که منجر به افزایش بیشتر میزان گاف انرژی در مخروط دیراک در مقایسه با دو حالت X و Y می شود (حدود ۲٤٠meV).

افزودن اثر میدان الکتریکی خارجی و ولتاژ گیت نیز میتواند در تغییر و تنظیم نتایج تاثیرگذار باشد.

## نتيجه گيرى

در این مقاله به صورت خلاصه اثر مغناطش و تابش نور بر فرمیون-های دیراک روی سطح عایق توپولوژیک سه بعدی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان میدهد با افزودن اثر مغناطش در راستاهای مختلف گاف نواری قابل توجهی مابین نوارهای رسانش و ظرفیت

ایجاد میشود. همچنین با تاثیر همزمان اثر وارپینگ و اعمال برهم-کنشهای خارجی از جمله نور و مغناطش در انرژیهای بالا منحنی-های رسم شده به ازای انرژی ثابت از شکل دانه برفی خارج میشوند و خواص الکترونی عایق دستخوش تغییر میشوند. همچنین با اعمال اثر تابش نور در حالت راستگرد و چپگرد میتوان نتایج وابسته به مقدار اسپین را در حالتهای متفاوت اندیس دره (η=±1) بررسی کرد و به بهینهسازی نتایج در راستای کاربردهای اپتو-اسپینترونیک پرداخت.

مرجعها

[1] Arabikhah, M., & Saffarzadeh, A. (2019). Surface state transport in double-gated and magnetized topological insulators with hexagonal warping effects. Journal of Physics: Condensed Matter, 31(44), 445001.

[2] Nikoofard, H., Esmaeilzadeh, M., Farghadan, R., & Sun, J. T. (2022). Quantum pumping through the surface states of a topological insulator. Physical Review B, 106(16), 165127.

[3] Cheng, R., & Zhou, X. (2019). Light-modulated valley-dependent birefringence of electron, the Brewster-like angles, and the giant magnetoresistance-like effect across a graphene-based junction. Journal of Applied Physics, 125(17), 175105.

[4] Chang, L. L., Wu, Q. P., Zhang, R. L., Li, Y. Z., Liu, M. R., Xiao, X. B., & Liu, Z. F. (2021). Spin-and valley-dependent energy band and polarization in ferromagnetic silicene superlattice with circularly polarized light. Physica B: Condensed Matter, 601, 412552.

[5] Ezawa, M. (2013). Photoinduced topological phase transition and a single Dirac-cone state in silicene. *Physical review letters*, *110*(2), 026603.

[7] Kitagawa, T., Oka, T., Brataas, A., Fu, L., & Demler, E. (2011).
 Transport properties of nonequilibrium systems under the application of light: Photoinduced quantum Hall insulators without Landau levels.
 Physical Review B, 84(23), 235108.

[v] Zhou, X., Xu, Y., & Jin, G. (2015). Anomalous thermomagnetic

effects in an epitaxial and irradiated graphene monolayer. *Physical Review B*, 92(23), 235436.



Ass





# فاز های بلور پیوندی در مدل هایزنبرگ پادفرومغناطیس بر روی نوار کاگومه

سلیمی ارشد ، سید امیر ' ؛ سیوف جهرمی، سید سعید '

دانشكده فيزيك دانشگاه تحصيلات تكميلي علوم پايه زنجان ، بلوار پرفسور يوسف ثبوتي ، زنجان

چکی*د*ہ

ملل هایزنبرگ پاد فرومغناطیس بر روی شبکه هایی با ساختار مثلثی از جمله شبکه کاگومه یکی از مللهای چالش برانگیز در فیزیک ماده چگال است که پتانسیل میزبانی فاز های جذابی از جمله مایع های کوانتومی اسیپینی و بلور های پیوندی دارد. این فاز ها که در نتیجه برهمکنش های کوانتومی ناشی از درماندگی مغناطیسی ظهور می کنند، هم از جنبه نظری و هم کاربردی دارای اهمیت ویژه هستند. در این مقاله با استفاده روش شبکه های تانسوری به مطالعه ملل هایزنبرگ پاد فرومغناطیس اسپین ۱/۲ بر روی شبکه ی شبه یک بعدی نوار کاگومه در حضور میدان مغناطیسی می پردازیم و دیاگرام فاز سیستم را برای شدت های مختلف میدان مغناطیسی استخراج می نماییم. یافته های ما نشان می دهد که دیاگرام فاز مختلف بلور پیوندی تشکیل شده که بر روی صفحات مغناطیسی با مغناطش ثابت ظهور می کنند. همچنین، تعدادی از صفحات مغناطیسی که پایداری بیشتری دارند را بررسی نموده و فاز های بلور پیوندی آنها را مشخصه یابی می نماییم.

واژه های کلیدی: نوار کاگومه، درماندگی مغناطیسی، شبکه های تانسوری

# Valence-Bond Crystal phases of the antiferromagnetic Heisenberg model on the Kagome stripe

#### Salimi Arshad, Seyed Amir<sup>1</sup>; Soyouf Jahromi, Seyed Saeed<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of physics, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences, Zanjan

#### Abstract

Antiferromagnetic Heisenberg model on lattices with triangular geometry such as Kagome lattice is one of the challenging models of condensed matter physics which can host exotic phases such as quantum spin liquids and valence-bond crystals (VBC). These phases which emerge due to the extensive quantum fluctuation induced by geometric frustration are important both from theoretical and experimental point of view. In this paper, we study the spin-1/2 Heisenberg on the quasi-onedimensional Kagome stripe in the presence of the magnetic field and extract the phase diagram of the model for different field strength. We show that the phase diagram is composed of various VBC phases which emerge on magnetic plateaus. We further characterize several of the VBC phases on those plateaus which are more stable.

Keywords: Kagome Stripe, Frustrated antiferromagnets, Tensor network

PACS No: 64.60, 71.10, 75.25

تحقیقات فراوان بوده است [۱]. مطالعات اخیر پیشنهاد می دهند که حالت پایه سیستم می تواند کاندید میزبانی مایع کوانتومی اسپینی و یا بلور پیوندی باشد [۲]. بعلاوه مطالعه سیستم در حضور میدان مغناطیسی منجر به مشاهده رفتار

مدل هایزنبرگ پادفرومغناطیس بر روی شبکه کاگومه یکی از چالش برانگیز ترین سیستم ها در فیزیک ماده چگال است که ماهیت حالت پایه آن از دیرباز محل بحث و

مقدمه


های جالبی از جمله ظهور صفحات مغناطیسی با مغناطش ثابت در حد شدت های مختلف میدان شده است. مغناطش میانگین در راستای میدان را بر روی هر صفحه می توان با یک مقدار کسری مشخص نمود [۳]. چنین رفتاری در صفحات مغناطیسی یادآور صفحات مقاومت الکتریکی در اثر کوانتومی کسری هال است که در حضور میدان مغناطیسی ظهور می کنند. با این تفاوت که اکنون چنین پدیده ای در یک سیستم اسپینی مشاهده می شود. این امر انگیزه ای مضاعف را برای مطالعه صفحات مغناطیسی و دسته بندی ماهیت فاز آنها فراهم می نماید [٤].

در همین راستا، در این مقاله به مطالعه مدل هایزنبرگ پادفرومغناطیس بر روی نوار شبه یک بعدی کاگومه (شکل ۱) در حضور میدان مغناطیسی می پردازیم و علاوه بر آشکار سازی صفحات مغناطیسی، تعدادی از فازهای نوظهور بر روی صفحات پایدار را مشخصه یابی می نماییم. به منظور یافتن حالت پایه سیستم و آشکار کردن صفحات مغناطیسی و گذار های فاز کوانتومی بین آنها از روش شبکه های تانسوری مبتنی بر تحول در زمان موهومی ( mininite مای تانسوری مبتنی بر تحول در زمان موهومی ( time evolving block decimation را استفاده نموده [٥] و نمایش تانسوری حالت پایه سیستم را بر روی یک نوار کاگومه با طول بینهایت در حد ترمودینامیک محاسبه می نماییم. سپس با محاسبه انرژی حالت پایه و مشتق آن و همچنین مغناطش میانگین در راستای میدان، دیاگرام فاز سیستم را استخراج نموده و تعدادی از فاز ها را مشخصه یابی می کنیم.

### مدل

هامیلتونی مدل هایزنبرگ پاد فرومغناطیس اسپین ۱/۲ در حظور میدان مغناطیسی بر روی نوار کاگومه (شکل ۱)، به صورت زیر تعریف می شود:

$$\mathbf{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{J}_{i,j} \, \mathbf{S}_i \, \cdot \, \mathbf{S}_j - \mathbf{h} \sum_i \mathbf{S}_i^Z \tag{1}$$

که در آن  $S^z$  عملگر اسپین ۱/۲ است،  $S^z$  مولفه Z میدان مغناطیس،  $J_{i,j}$  شدت برهمکنش پادفرومغناطیس هایزنبرگ و h شدت میدان مغناطیسی در راستای Z می باشد. بعلاوه < i,j > در جمله جمع اول بیانگر جمع بر روی همسایه های نزدیک است. در حد میدان های بسیار قوی سیستم در فاز قطبیده قرار می گیرد که در آن همه اسپینها با میدان مغناطیسی هم راستا می باشند. در حد برهمکنش های قوی هایزنبرگ اما حالت پایه سیستم نامعلوم است.



شکل ۱ : نوار کاگومه که به صورت برش شبه یک بعدی از شبکه کاگومه دو بعدی حاصل می شود. دایره های جایگاه های شبکه که بر روی آنها اسپین های ۱/۲ قرار دارد را توصیف می نماید.

به دلیل درماندگی هندسی از ساختار مثلثی شبکه کاگومه، شکل گیری یک آرایش یکتا از اسپینهای پاد موازی در راس های مثلث ها امکانپذیر نبوده و حالت پایه سیستم با کمینه انرژی پیوند های شبکه برابر نخواهد بود. بعلاوه هامیلتونی (۱) حل پذیر دقیق نبوده و یافتن حالت پایه سیستم در حد برهمکنش های مختلف مستلزم استفاده از روش های عددی می باشد.

### شبکه های تانسوری

شبکه های تانسوری می توانند نمایش بهینه ای از حالت پایه هامیلتونیهای موضعی را بر اساس ساختار درهمتنیدگی اجزای سیستم درحد ترمودینامیک به صورت حاصلضربی از تانسورهای موضعی فراهم نمایند. نمایش تانسوری یک تابع موج در حالت کلی به صورت زیر نمایش داده می شود:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\left\{s_{r_{i}}\right\}_{i=1}^{N}}^{d} F\left(A_{s_{r_{1}}}^{[r_{1}]}, ..., A_{s_{r_{N}}}^{[r_{N}]}\right) |s_{r_{1}}, ..., s_{r_{N}}\rangle,$$



 $r_i$  که در آن $\left| s_{r_i} 
ight|$  حالت فیزیکی سیستم در جایگاه i در مکان می توان با بررسی انرژی حالت پایه و مشتقات آن آشکار کرد. نسبت به هندسهی شبکه و  $\left[ {{r_r_i} \atop {s_{r_i}}} 
ight]$  تانسورهای موضعی هستند. نمایش تانسوری تابع موج را یا به صورت دقیق و یا با استفاده از روش های مبتنی بر تحول زمانی یا روش های وردشی محاسبه نمود. در این مقاله با استفاده از تحول یک حالت اولیه تصادفی در زمان موهومی تحت اثر هامیلتونی (۱) با استفاده از روش iTEBD حالت پایه مدل هایزنبرگ پادفرومغناطیس را در حد شدت های مختلف میدان مغناطیسی محاسبه می نماییم. N D=8 0.8 0.6 Mz

دیاگرام فاز

شکل ۲ مغناطش میانگین در راستای z که به صورت زیر تعریف می شود را نمایش می دهد:

$$M_z = \sum_i M_z^i / N$$
 (2)

که در آن N تعداد سایت های موجود در سلول واحد دوره ای است که محاسبات شبکه های تانسوری بر روی آن انجام شده شده است.



شکل ۲ : مغناطش میانگین در راستای z. صفحات مغناطیسی مختلف در شدت میدان مغناطیسی و مقدار مغناطش کسری اشباع آنها قابل تشخيص است.

همانطور که مشاهده می شود فاز های مختلف سیستم توسط صفحات مغناطیسی با مغناطش اشباع کسری ثابت بر روی هر صفحه قابل تشخيص است. به طور خاص صفحات مغناطيسي با مقادیر M<sub>z</sub> = ۱/۱۰, ۱/۵, ۳/۱۰, ۲/۵, ۱/۲, ۳/۵ در محاسبات ITEBD بر روی یک سلول واحد دوره ای با ۲۰ جایگاه نشان داده شده است. گذار فاز بین هر یک از صفحات مغناطیسی را

شکل ۳ نمودار انرژی حالت پایه بر جایگاه را بر حسب میدان مغناطیسی نشان می دهد. گذار فاز کوانتومی بین فاز های مختلف سیستم را علاوه بر نمودار مغناطش میانگین، با استفاده از مشتق انرژی حالت پایه نیز می توان آشکار کرد. شکل ٤ مشتق مرتبه اول انرژی بر حسب میدان مغناطیسی را نشان می دهد. ناپیوستگی های موجود در مشتق مرتبه اول انرژی بیانگر این امر است که فاز های موجود در صفحات مغناطیسی با گذار فاز مرتبه اول ازیکدیگر جدا می شوند. همانطور که صفحات مختلف مقاومت مغناطیسی در اثر کسری کوانتومی هال به دلیل میزبانی از فازهای جذابی از جمله فاز های توپولوژیک از اهمیت ویژه ای برخوردار است، در ادامه به مشخصه یابی و دسته بندی فاز های موجود در صفحات مغناطیسی بر روی صفحات M<sub>z</sub> = 1/0 , ۲/0, ۳/۵ که پایداری بیشتری نسبت به سایر صفحات دارند (در ناحیه بیشتری از شدت میدان حظور دارند) می پردازیم. به منظور بررسی ویژگی های صفحات مغناطیسی ذکر شده مغناطش موضعی در راستای z در جایگاه های شـبکه و همبسـتگی اسـپین-اسـپین بین همسایه های نزدیک، <Sr.Sr+l> ، را محاسبه نمودیم. شکل ۵ شدت مغناطش و همبستگی اسپینی بر روی باند های شبکه را برای صفحات ۲/۵, ۳/۵ , ۱/۵ به ترتیب در شدت های میدان ۳. و ۰. و ۱. و ۱. و ۱. نشان می دهد. همبستگی های مثبت در شکل توسط خط چین نشان داده شده. بعلاوه همبستگیهای منفی با خطوط پیوسته با ضخامتها و رنگهای متفاوت نشان داده شده است. مغناطش موضعی مثبت و منفی نیز به ترتیب با دایره های آبی و قرمز نمایش داده شده است. طرح های حاصل از همبستگی های اسپینی به وضوح نشان دهنده شکست تقارن C6 شـــش ظلعی ها و تقارن C3 بر روی مثلث های کاگومه است. حاصل این شکست تقارن ظهور فاز های بلور پیوندی با حالت های پایه تبهگن است که از طریق تقارن با یکدیگر مرتبط هستند. به عبارت دیگر، سایر حللت های تبهگن را میتوان از چرخش چیدمان همبستگی ها بر روی باند های شبکه بدست آورد. لازم به ذکر است که سایر حالت های تبهگن در شبیه سازی های شبکه تانسوری با شروع از حالت های اولیه تصادفی متفاوت بدست می آید.







شکل ۳ : انرژی حالت پایه بر جایگاه بر حسب شدت میدان مغناطیسی برای باند مجازی B = B.



شــکل ٤ : مشــتق مرتبه ی اول انرژی نســبت به میدان مغناطیســی. خاپیوســتگی ها در مشــتق مرتبه اول بیانگر گذار فاز مرتبه اول بین فازهای مختلف سیستم است.

## نتيجه گيرى

در این مقاله دیاگرام فاز مدل هایزنبرگ پاد فرومغناطیس اسپین ۱/۲ را بر روی نوار کاگومه در حضور میدان مغناطیسی مورد بررسی و مطالعه قرار دادیم. با استفاده از روش شبکه های تانسوری یک بعدی و محاسبه حالت پایه سیتم در حد ترمودینامیک، فاز ها و گذار فاز کوانتومی بین آنها را با بررسی انرژی و مشتق آن و همچنین مغناطش آشکار نمودیم. یافته های ما نشان می دهد که در حضور میدان مغناطیسی و در دمای صفر دیاگرام فاز سیستم شامل صفحات مغناطیسی با مغناطش ثابت است که مشابه مقاومت الکتریکی در اثر کوانتومی کسری هال، توسط مغناطش کسری اشباع مشخصه یابی می شود.



شکل ۵ : فاز های پیوند بلوری در صفحه های مغناطیسی ۲/۵, ۱/۵ ۳/۵. در شدت های مغناطیسی مختلف. رنگ ها و ضخامت باند ها همبستگیهای مختلف را نشان می دهد. مغناطشهای مثبت با رنگ آبی و مغناطش منفی با رنگ قرمز نشان داده شده است.

همچنین مطالعه مغناطش و همبستگی اسپینی بر روی این صفحات مغناطیسی تراکم ناپذیر نشان می دهد که ماهیت حالت پایه در موارد مطالعه شده از نوع بلور پیوندی می باشد که تقارن های 26 و 23 هامیلتونی را میشکند و توسط حالت های تبهگنی از چیدمان همبستگی اسپینی بر روی باند های شبکه توصیف می شود.

مرجع ها

[1] Katsuhiro Morita, Takanori Sugimoto, Shigetoshi Sota, and Takami Tohyama Magnetization plateaus in the spin- 1/ 2 antiferromagnetic Heisenberg model on a kagome-strip chain *PhysRevB.***97**.014412 (2018)

[2] C. Lacroix, P. Mendels, and F. Mila, *Introduction to Frustrated Magnetism Materials, Experiments*, Theory (Springer, Berlin, 2013)

[3] Thibaut Picot, Marc Ziegler, Román Orús, and Didier Poilblanc Spin-S kagome quantum antiferromagnets in a field with tensor networks *Phys. Rev. B* **93**, 060407 (2016)

[4] Katsuhiro Morita, Shigetoshi Sota3 & Takami Tohyama Resonating dimer–monomer liquid state in a magnetization plateau of a spin-1/2 kagome-strip Heisenberg chain *Communications Physics volume 4*, Article number: **161** (2021)

[5] G. Vidal Classical Simulation of Infinite-Size Quantum Lattice Systems in One Spatial Dimension *PRL* **98**, 070201 (2007)





## ساخت و مشخصه یابی صفحات دوبعدی Ti<sub>2</sub>C به روش لایه برداری با اسید HF

اسکندرلی ، اسما<sup>1</sup>؛ خزائی ، محمد<sup>1</sup>؛ محمدی زادہ ، محمدرضا<sup>1</sup>

<sup>1</sup> زمایشگاه پژوهشی ابر رسانایی و ابر مواد ، دانشکده فیزیک دانشگاه تهران ، انتهای خیابان کارگر شمالی ، تهران

### چکیدہ

در این پژوهش ساخت و مشخصه یابی نانوصفحات دو بعدی Ti<sub>2</sub>C با لایه برداری انتخابی شیمیایی پودرهای فاز مکس Ti<sub>2</sub>AlC با غوطه ور کردن در اسید هیدروفلوئوریک، در دمای اتاق را گزارش کرده ایم. کار با ساخت پودر فاز مکس Ti<sub>2</sub>AlC، از عناصر اولیه ی آن با نسبت های تناسب عنصری به روش تف جوشی بدون اعمال فشار (PLS) در دمای 1100°C تحت اتمسفر آرگون آغاز شد. آنالیز پراش اشعه ی X و تصویر برداری میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) به منظور بررسی ترکیب فاز ایجاد شده مورد استفاده قرار گرفت. تصاویر SEM تشکیل مکسین Ti2C را نشان می دهد. اما فراوانی به اندازهای نیست که در نتایج XD رؤیت شود.

واژه های کلیدی: مکسین، فاز مکس، نانوصفحات Ti<sub>2</sub>C، ساختار دویعدی، Ti<sub>2</sub>AlC

### Synthesis and characterization of two dimensional Ti<sub>2</sub>C MXene sheets

### Eskandarli, Asma<sup>1</sup>; Khazaei, Mohammad<sup>1</sup>; Mohammadizadeh, Mohammad Reza<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Superconductivity Research Laboratory (SRL), Department of Physics, University of Tehran, North Kargar Ave., Tehran, Iran

### Abstract

Here, we report the fabrication and characterization of two-dimensional (2D) Ti<sub>2</sub>C nano-sheets by selectively exfoliating the atomic Al layers from Ti<sub>2</sub>AlC MAX phase powder immersed in an aqueous hydrofluoric acid solution at room temperature. The Ti2AlC MAX phase powder was synthesized from its elemental Ti, Al, and C (graphite) powders with a stoichiometric ratio of 2:1:1 using pressure-less sintering at 1100°C under argon atmosphere. X-ray diffraction and scanning electron microscopy (SEM) were used to investigate the created phases. The SEM images show the formation of Ti2C maxine. But its abundance is not as much as can be seen in the XRD results.

Keywords: MXene, MAX phase, Ti<sub>2</sub>C nano-sheets, two-dimensional structure, Ti<sub>2</sub>AlC

PACS No. 61

لایه با خواص ناهمسانگرد را تشکیل می دهند[2,3]. در حقیقت لایههایی از هشت وجهیهای M<sub>6</sub>X با لبه های مشترک، با لایه های عنصر گروه A ی خالص، درهم آمیخته می شوند. پیوند فلزی بین لایههای M-A که معمولاً ضعیف تر از پیوندهای M-X است، لایههای M<sub>n+1</sub>X<sub>n</sub> را کنار هم نگه می دارد؛ بنابراین لایه برداری انتخابی لایه های A را ممکن می سازد.[4] مقدمه

MAX phase ها، مواد سه لایه ای تکرار شونده ای هستند که در آن ها لایه های M<sub>n+1</sub>X<sub>n</sub> با لایه هایی از عنصر A به هم پیوند می خورند[1]. فرمول شیمیایی آن ها M<sub>n+1</sub>AX<sub>n</sub> است، که در آن M<sub>n+1</sub>AX<sub>n</sub> یک فلز واسطه ی اولیه، A عناصر گروه 13 تا 16 جدول تناوبی، و X کربن و یا نیتروژن است، که ساختارهای چند

در سال 2011، نشان داده شد که به منظور تشکیل نوع جدیدی از مواد دو بعدی، به نام MXene، میتوان لایههای A را بهطور انتخابی از فازهای مکس لایهبرداری کرد[5]. مکسینها ساختار کلی M<sub>n+1</sub>X<sub>n</sub>T<sub>x</sub> را دارند، که در آن T<sub>x</sub> مخفف گروههای

پایان دهنده ی سطحی مانند O، OH، F و ID است. [6] مکسینها در ذخیره سازی انرژی، رسانایی الکتریکی و از نظر مکانیکی و آبدوستی، خواص منحصر به فردی از خود نشان می-دهند؛ که آن ها را کاندیدای مناسبی در ساخت باتریهای لیتیومی، شبه خازنها، محیط ذخیرهی هیدروژن، محیط جذب سرب، تقویت کنندهها در پلیمرها، کاتالیزور، دستگاههای تصفیهی آب و نانو دستگاههای دو بعدی میکند.



جدول1 : الف) اتم های مختلف فاز مکس، ب) مراحل سنتز بالا به پایین نانوصفحات مکسین از فاز مکس مادر[7].

## روشهای آزمایشی

ساخت فاز مكس: ساخت پودر فاز مكس Ti2AlC با مخلوط كردن پودرهای عناصر اولیهی تیتانیوم (میانگین اندازه ی ذرات: 45 میكرون و خلوص 99٪)، آلومینیوم (میانگین اندازه ی ذرات: 45 میكرون و خلوص 99٪) و گرافیت با نسبتهای مولی 1:1:2 در آسیاب گلولهای رومیزی سیاره ای آغاز كردیم.. مخلوط سه پودر را به مدت 10 ساعت و با سرعت 276 دور بر دقیقه در اتمسفر آرگون آسیاب كردیم. كاپها و گلولهها را از جنس زیركونیا انتخاب كردیم و نسبت گلوله به پودر 1:01 بود. سپس مخلوط پودری تحت فشار 300 بار پرس كردیم و قرصی به ضخامت 16 میلی متر ساختیم. قرص را در كورهی لولهای تحت اتمسفر آرگون با نرخ افزایش دمای 10 درجهی سانتی گراد بر دقیقه قرار دادیم. قرص به مدت 2 ساعت در دمای 2°00 در كوره حرارت دید.

پس از خارج کردن قرص از کوره، به مدت 10 دقیقه در آسیاب گلولهای آن را پودر کردیم.

ساخت مکسین: 0.5 گرم پودر Ti<sub>2</sub>AlC به آرامی به 10 میلی لیتر اسید هیدروفلوئوریک 30 و 10 درصد اضافه کیم و محلول حاصل را روی استیرر به مدت 5 ساعت در دمای اتاق قرار دادیم. سپس محلول را 7 مرتبه با سانتریفیوژ با سرعت 3500 دور بر دقیقه و هر بار به مدت 5 دقیقه شست وشو دادیم. تا زمانی که PH محلول حدوداً 6 شود. در نهایت پس از عبور دادن محلول از صافی،آن را با یک لیتر آب مقطر شستیم و پودر باقی مانده روی صافی را در آون خلا در دمای°80 به مدت 42 ساعت قرار دادیم. در آخر پودر نهایی برای آنالیزهای SEM و CRD مورد بررسی قرار گرفت.

## تحليل آناليزها

Ti<sub>3</sub>AlC<sub>2</sub> به این دلیل که در زاویه های <sup>9</sup>05 و <sup>60</sup>% فاز مکس Ti<sub>2</sub>AlC<sub>2</sub> و Ti<sub>2</sub>AlC و Ti قلههای نزدیک به هم دارند و بنا به جدول 1، راه حل تشخیص این سه ماده از یکدیگر، قلههای مشخصهیشان می دهد است. شکل 1 طیف XRD از پودر مکس فیز را نشان می دهد قلهی مشخصه ی 12 قلهی مشخصه ی 13 درجه ی Ti<sub>2</sub>AlC و همچنین قلههای دیگر مربوط به این ماده، تشکیل این فاز مکس را ثابت میکند. پیک مربوط به این ماده، تشکیل این فاز مکس را ثابت میکند. پیک الگوی پراش به چشم می خورد. شکل 2 تصویر SEM فاز مکس ساخته شده است که ترکیب لایه ای در آن مشهود است. مدان XRD فاز مکس را تابت میکند. پیک الگوی پراش به چشم می خورد. شکل 2 تصویر Ti مشهود است.

$Ti_3AlC_2[3]$		Ti <sub>2</sub> AlC[1	Ti <sub>2</sub> AlC[1]		TiC[1	
20	$I/I_0$	20	$I/I_0$	$2\theta$	$I/I_0$	
9.5	26.5					
		13.0	39			
34.1	20	34.0	19			
				35.9	78	
36.8	7.6					
38.9	20					
39.1	100					
		39.6	100			
		39.8	18			
41.9	28.1			41.7	100	
48.6	7.8					
		53.3	14			
56.6	11.6					
60.3	23.6					
				60.5	60	
		61.0	14			
70.6	11.2					
		72.1	9	72.4	30	
74.2	18.2					
74.6	8.5					
		75.3	11			
				76.2	17	





شکل l : الگوی پراش اشعهی ایکس فاز مکس به دست آمده از نسبتهای مولی Ti:Al:C = 2:1:1



شكل2 : تصوير ميكروسكوپ الكترونى روبشي پودر فازمكس Ti2AlC قبل از غوطه ورى در اسيدHF .

برای تشخیص تشکیل مکسین Ti<sub>2</sub>C علاوه بر الگوی پراش اشعه ی ایکس پودر مد نظر به تصویر میکروسکوپ الکترونی از آن نیز نیازمندیم. در تصویر SEM شکل 3، صفحات لایه ای از هم جدا شده ی آکاردیون مانند مکسین به وضوح دیده می شود.



شكل 3 : تصوير ميكروسكوپ الكترونى روبشي پودر فاز مكس Ti2AlC پس از لايه بردارى با اسيد HF ٪30.

ما برای حذف لایه های آلومینیوم از اسید HF استفاده کردیم چون می تواند، مرز دانه های فازهای مکس را حکاکی کند و ذرات بزرگ چند دانه ای را به دانه های کوچکتر تجزیه کند. همچنین؛ HF یکی از معدود محلول های حکاکی است که می تواند اکسید تیتانیوم را که معمولاً به عنوان یک لایه ی محافظ نازک روی سطح فازهای مکس حاوی Ti وجود دارد را لایه برداری کند که این حکاکی لایه ی اکسید برای واکنش لایه های A با اسید، در فازهای مکس ضروری است.

فرایند افزودن پودر فاز مکس به اسید HF، منجر به یک واکنش گرمازا همراه با ظاهرشدن مقادیر زیادی حباب H2 و گونه-های فلوراید فلزی در محلول شد[5]. در حقیقت؛ یک واکنش شیمیایی مطابق رابطهی زیر به وقوع پیوسته است:

 $Ti_2AIC(s) + 3HF(l) = Ti_2C(s) + AIF_3(s) + 3/2H_2(g)$ شکل 4 نشان میدهد که تمام قلههای XRD مربوط به

ستکن کسان می دهند که کمام قلعهای HF مربوط به Ti2AlC، پس از لایهبرداری در اسید HF ناپدید شدهاند. همچنین خبری از Al هم نیست، فقط قلههای TiC که به عنوان ناخالصی در فاز مکس وجود داشت، در زاویههای 93.43° 42.28 و 97.60° نیز شناسایی شدند[5].



شکل4 : به ترتیب از بالا به پایین، الگوی پراش اشعهی ایکس فاز مکس Ti2AIC پس از لایه برداری در اسید HF. 10٪ و 30% به مدت 5 ساعت.

بخشی از این TiC موجود در محصول نهایی ممکن است متعلق به ناخالصی TiC در فاز مکس اولیه باشد و در خصوص مابقی آن، به نظر می رسد که بخش زیادی از Ti<sub>2</sub>AlC در اسید HF حل شده است[5] و مقدار کمی که در تصویر SEM دیده می شود، به مکسین Ti<sub>2</sub>C و ناکافی مکسین Ti<sub>2</sub>C در نمونه باعث شد که، قله های مربوط به آن را در

پراش شکل4 مشاهده نکنیم. از طرف دیگر در تصویربرداری SEM، به دنبال ساختار لایهای مکسین Ti<sub>2</sub>C، نواحی مختلف نمونه را بررسی کردیم و در نهایت تصویر SEM شکل3 را انتخاب کردیم که ساختار ورقهای مکسین Ti<sub>2</sub>C را نشان می دهد.

همچنان در حال کار بر روی نمونههای بیشتری هستیم تا بتوانیم مقدار مکسین Ti<sub>2</sub>C تولیدی را افزایش دهیم.

با توجه به شکل 4، با کاهش غلظت اسید HF شدت قلههای TiC کاهش می یابد و البته پیک اصلی از فاز مکس با شدت بسیار کم نیز به چشم میخورد. همچنین قلههای پراش اشعهی ایکس با افزایش غلظت اسید HF به مقادیر زاویهی بالاتر منتقل شدهاند. این پدیده نشان میدهد که با افزایش غلظت HF، فاصلهی d صفحات کاهش می یابد. انتقال قلهی مشاهده شده به زوایای بالاتر را می-توان به انتشار اتمهای Al موجود در محلول ساختار TiC به دست آمده نسبت داد. در واقع شعاع اتمی Al کمتر از Ti است و بر این اساس انتشار اتمهای Al در ساختار TiC باعث کاهش پارامتر شبکه TiC شده است. علاوه بر این، به نظر میرسد که با افزایش غلظت اسید HF، اتمهای Al بیشتری در ساختار شبکه TiC منتشر شدهاند که منجر به جابهجایی قلهها به زوایای بالاتر میشود. به علاوه FWHM ييکهاي شکل 4 با افزايش غلظت اسيد از 10 به 30، كاهش مى يابد. اندازەي بلوركھا با مقدار FWHM رابطەي معکوس دارد. به عبارت دیگر، تجزیه Ti<sub>2</sub>AlC به TiC، منجر به بزرگتر شدن اندازهی کریستال می شود. کاهش FWHM با افزایش غلظت اسید HF، نشاندهنده ی تبلور مجدد ذرات TiC است. ساختار بلوری Ti<sub>2</sub>AlC و TiC به ترتیب شش ضلعی و مکعبی است. برای درک فرایند تبدیل فاز مکس به TiC، می توان رابطهی ساختار بلوری این دو را بیان کرد. برای Tic و Ti2AlC توالی لايهها، به ترتيب مطابق با نمادهاي (1) و (2) هستند:

لایههای Al می شود و در نهایت، توزیع مجدد دور برد اتمهای C باعث تبدیل Ti<sub>2</sub>C می شود.

بنابراین می توان نتیجه گرفت که لایه برداری فاز مکس منجر به تولید مکسین شده است که آثار آن در شکل 3 موجود است، اما مدت زمان غوطهوری و غلظت اسید HF باعث تغییر ریختار شده است و ظاهراً باید زمان های غوطه وری در اسید برای کمتر از ساعت هم بررسی شود و آزمایشات و آنالیزهای دیگری باید انجام گیرد.

## نتيجه گيرى

Ti<sub>2</sub>AIC در این مطالعه، ارزیابی فاز و ریختار پودر فاز مکس Ti<sub>2</sub>AIC تهیه شده پس از غوطهوری در محلول HF، مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که پودر فاز مکس Ti<sub>2</sub>AIC پس از غوطه ور شدن در محلول HF به Ti تبدیل شد. در این راستا، مشاهدات XRD نشان داد که فاز مکس Ti<sub>2</sub>AlC پس از غوطهوری در اسید ناپدید شد. علاوه بر این، مقدار HWH قله-های پراش Ti به دست آمده با افزایش غلظت اسید، کاهش یافت. این مشاهدات نشان داد که یک فرآیند تبلور برای ذرات Ti رخ داده است و به نظر میرسد که افزایش غلظت اسید، شکل ذرات از چند وجهی به TiC مکعبی بریده تغییر کرده است.

مرجعها

M. Naguib, M. Kurtoglu, V. Presser, J. Lu, J. Niu, M. Heon, L. Hultman, Y. Gogotsi, M.W. Barsoum, "Two-dimensional nanocrystals produced by exfoliation of Ti3AlC2", *Adv. Mater.* 23 (2011) 4248-4253.
 Barsoum, M. W. (2013). "MAX phases: Properties of machinable

ternary carbides and nitrides". *Weinheim: Wiley*.

[3] M. W. Barsoum , Prog. Solid State Chem. 2000 , 28 , 201 .

[4] K. R. G. Lim, M. Shekhirev, B. C. Wyatt, B. Anasori, Y. Gogotsi, and Z.W.Seh, "Fundamentals of MXene synthesis", *Nature synthesis* 1, pages601–614 (2022).

[5] M. Anayee, C. E. Shuck, M. Shekhirev, A. Goad, R. Wang, Y. Gogotsi, "*Kinetics of Ti3AlC2 Etching for Ti3C2Tx MXene Synthesis*"; Chem. Mater. 2022, 34, 21, 9589–9600.

[6] Babak Anasori • Yury Gogotsi;"2D Metal Carbides and Nitrides (MXenes) Structure, Properties and Applications."; *Springer Nature Switzerland* AG 2019.

[7] Naguib M, Mashtalir O,Lu J, Hultman L, Gogotsi Y and Barsoum M W 2012;"2D transition metal carbides"; *ACS Nano* **6** 1322–31

[8] H. Aghamohammadi, A. Heidarpour, R. Jamshidi, "*The phase and morphological evolution of Ti3SiC2 MAX phase powder after HF treatment*", Ceram. Int. **44** (2018) 17992–18000.





## مطالعهی ذخیره سازی هیدروژن در الکترود Cu- Fe/MWCNT شکوفه سیفی علمی'؛ مریم مالمیر' <sup>ا</sup>گروه فیزیک دانشگاه لرستان ، خرمآباد، لرستان

### چکیدہ

نانولولههای کربنی نقش مهمی در ذخیره سازی هیاروژن درون ساختارتوخالی خود دارند. هیاروژن یکی از منابع ذخیره سازی انرزی به شمار می رود که میتواند به صورت یک گاز، یک مایع یا پیوند با یک مادهی جامد ذخیره شود. دراین مقاله ذخیرهسازی هیاروژن و تعداد چرخههای واجذب در الکترود Cu- Fe/MWCNT مورد مطالعه قرار میگیرد. به تعداد ۱۳ چرخه جذب و واجذب هیاروژن انجام شد که این تعداد نشان دهندهی پایدار بودن الکترود کار است. در جریان یک میلی آمپر و سیکل سیزدهم میزان ظرفیت واجذب هیاروژن به مقدار بالای ۲۵۰۰ میلی آمپر ساعت بر گرم رسید.

واژه های کلیدی: ذخیره سازی هیدروژن، نانولوله های کربنی، الکترود Cu-Fe/MWCNT.

### Study of hydrogen storage in Cu-Fe/MWCNT electrode

Seifi Elmi, Shokoofeh<sup>1</sup>; Malmir, Maryam<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, University of lorestan, Khorramabad, Lorestan

#### Abstract

Carbon nanotubes play an important role in storing hydrogen inside their hollow structure. Hydrogen is one of the sources of energy storage that can be stored as a gas, a liquid or a bond with a solid substance. In this article, hydrogen storage and the number of desorption cycles in the Cu-Fe/MWCNT electrode are studied. The 13 cycles of hydrogen absorption and desorption were performed, which indicates the stability of the working electrode. In the current of one mA and the 13th cycle, the amount of hydrogen absorption capacity reached a value above 2500 mAh/gr.

*Keywords: Hydrogen storage, carbon nanotubes, Cu-Fe/MWCNT* 68

مطالعات اخیر نشان داده است که ساختار توخالی نانو لولههای کربنی می تواند مخزن مناسبی برای ذخیره این سوخت ارزشمند باشد [1]. نانولولههای کربنی دارای ظرفیت مناسب ذخیره هیدروژن هستند و همچنین گاز را به صورتی بسیار ایمن درون ساختار خود حفظ می کنند. ساختارهای کربن وهیدروژن نانولوله های کربنی طی آزمایشی تصادفی که سومیو ایجیما درسال ۱۹۹۱ میلادی برای مطالعهی سطح صفحات گرافیتی الکترودهای به کار رفته در تخلیه قوس الکتریکی انجام می داد کشف شد [۲]. دریک نانولولهی کربنی اتمهای کربن در یک ساختار استوانهای آرایش یافتهاند آرایش اتم های کربن در مقدمه

استفاده از انرژی و سوختهای دیگر مانند هیدروژن به جای سوختهای فسیلی برای تولید انرژی مخصوصاً در وسایل نقلیه بسیار مورد توجه قرار گرفته است. علم نانو توانایی به دست گرفتن کنترل ماده در ابعاد نانومتری و بهره برداری از خواص و پدیدههای نانومتری در مواد، ابزارها و دستگاه های جدید است. یکی از مهمترین این فناوریها نانو لولههای کربنی است. نانولوله-های کربنی استوانههای تو خالی از ورقهای گرافیت هستند.



دیواره ی این ساختار استوانهای دقیقاً مشابه آرایش کربن در صفحه ی گرافن است. ساختار مختلف کربنی مانند گرافیت فولرن و نانولوله ی کربنی دارای نسبت سطح به حجم بالایی هستند. نانولولههای کربنی عمدتاً با استفاده از سه روش اصلی تولید می شوند: تخلیه قوس الکتریکی، فرسایش لیزری و نشست بخار شیمیایی. خواص الکترونی، مولکولی و ساختاری نانو لوله اتا حد زیادی از ساختار تقریباً یک بعدی آن ها ناشی می شود. مشخص شده است که نانولولههای کربنی قادرند هیدروژن را به صورت الکتروشیمیایی به میزان کمتر از یک بسیار پایین تر از حد ٦ تا ٥,٦ درصدی تعیین شده برای کاربرد در منابع سوختی می باشد، با این حال روش های الکتروشیمیایی، به مان مزایای عملی بسیار، همچنان به عنوان یکی از بهترین روش-مای دلیل مزایای عملی بسیار، همچنان به عنوان یکی از بهترین روش-مای در نظر گرفته می شود [۳].

## روش آزمایش

ابتدا با استفاده از فرایند اسید شویی به آمادهسازی نانولولههای کربنی میپردازیم. سپس برای ساخت الکترود کار با استفاده از روش أبكاري الكتريكي لايهي خالصي از أهن به همراه نانولولهي کربنی را بر روی زیر لایهی مس که دارای خلل و فرج بسیاری است نشانده شد. برای این کار محلول آبکاری به صورت زیر تهیه شد: ۲۸۳ CaCl2 ، ۲۰۸۱ الارم ۱٤/۹۱ ، ۲۰/۰۰گرم نانولولهی کربنی چند دیواره و CTAB ۰/۰۰۱ را با آب دو بار تقطیر به حجم ۵۰ میلی لیتر رسانده شد و به مدت سه ساعت در آلتراسونیک به منظور بدست آوردن محلولی یکنواخت، قرار داده شد. سیس با جریان یک میلی آمیر و چرخش مگنت با ۳۰۰ rpm و دمای ۵۰ درجه سانتگراد، به مدت ۵ دقیقه آبکاری صورت گرفت. از دستگاه sama500 با یک سل سه الکترودی برای بررسی ظرفیت ذخیرهسازی هیدروژن و میزان چرخه پذیری آن جهت بهبود عملکرد ذخیرهسازی بهره گرفته شد. که الکترود پلاتین وAg/AgCl به ترتیب به عنوان الکترود شمارنده و مرجع و الكترود ساخته شده به روش الكتروشيميايي به عنوان الكترود کار مورد استفاده قرارگرفت. شکل ۱، الکترود کار ساخته شده به

روش الکتروشیمیایی را نشان میدهد. شکل ۲ نمایی از دستگاه و الکترودها به منظور بررسی ذخیره سازی هیدروژن را نمایش می-دهد



شكل ۱. الكترود كار Cu-Fe/MWCNT.



شکل ۲. دستگاه الکترو شیمیایی و نمایش سه الکترود جهت ذخیرهسازی هیدروؤن.



چر خههای مختلف.



Cu-Fe/ میزان ظرفیت واجذب را در الکترود /Cu-Fe شکل ۳ میزان ظرفیت واجذب را در الکترود (واجذب هیدروژن در این الکترود انجام شد که این تعداد چرخه نشان از پایدار بودن الکترود کار دارد. با توجه به نمودارهای آمده درچرخههای مختلف می بینیم که با افزایش تعداد چرخهها میزان ظرفیت واجذب افزایش یافته است و در چرخهی سیزدهم این میزان به مقدار واجذب پایدار خود به ازای جریان ۱ میلی آمپر رسیده است. این بیشترین مقدار در حدود آبا توجه است.

## نتيجه گيرى

نانولولههای کربنی دارای ظرفیت مناسب ذخیره هیدروژن هستند و همچنین گاز را به صورتی بسیار ایمن درون ساختار خود حفظ میکنند. در این مقاله ذخیره سازی هیدروزن و تعداد چرخه-ای واجذب در الکترودCu-Fe/ MWCNT مورد مطالعه قرار گرفت. که در جریان یک میلی آمپر و چرخهی سیزدهم میزان ظرفیت واجذب هیدروژن به مقدار بالای ۲۰۰۰ میلی آمپر ساعت برگرم نشان داده شد.

مرجعها

[1] G. SeiFert, Solid State Ionics 168 (2004) 265-269.
[2] S. Iijima, Nature, 354 (1991) 56-58.
[7] ذولفقاری، علیرضا، "نانوتیوبهای کربنی برهمکنش با سیال"؛ دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، چاپ اول، ۱۳۸۲، صفحه ۱ و ۹۹.





تأثیر زمان الکتروانباشت بر ظرفیت ویژه الکترودهای ابرخازن MnO<sub>r</sub> سلطانی، حامد'؛ بحیرائی، حامد'؛ قاسمی، شهناز<sup>۲</sup> <sup>۱</sup> گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه دانشگاه ملایر ۲ پژوهشکده انرژی،آب و محیط زیست دانشگاه صنعتی شریف

### چکیدہ

در این پژوهش، الکترودهای اکسید منیزیم (۲ MnO) با استفاده از روش الکتروانباشت و بدون استفاده از بایندر بر روی فوم نیکل لایه نشانی شدند. عملکرد خازنی الکترودهای تهیه شده با زمان رسوب گذاری متفاوت ۱ تا ۱۵ دقیقه در حضور الکترولیت با غلظت ۰/۱ مولار توسط ولتامتری چرخهای VV و آزمایش های شارژ/دشارژ مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان دادند که مدت زمان رسوب گذاری، ریختشناسی و ویژگیهای الکتروشیمیایی الکترودها را تحت تأثیر قرا می-دهد. محاسبهی ظرفیت ویژه الکترودها با استفاده از منحنیهای ولتامتری چرخهای (CV) مشخص کرد که الکترود تهیه شده با زمان الکتروانباشت ۱ دقیقهای نسبت به سایر نمونهها داری بالاترین ظرفیت ویژه برایر با <sup>1-</sup> T1۴ Fg (در سرعت اسکن <sup>1-</sup> T0 سکن ۲۰ میباشد.

واژه های کلیدی: ابرخازن، اکسید منگنز، الکتروانباشت.

Effect of electrodeposition time on the specific capacitance of MnO<sub>7</sub> supercapacitor

electrodes Soltani, Hamed'; Bahiraei, Hamed; Ghasemi, Shahnaz'

<sup>'</sup> Department of Physics, Faculty of Science, Malayer University, Malayer <sup>'</sup> Sharif Energy, Water and Environment Institute, Sharif University of Technology

#### Abstract

In this work, manganese oxide  $(MnO_r)$  electrodes were deposited on the Ni foam without any binder through a simple electrodeposition process. The capacitive performance of the prepared electrodes at various time deposition of 1 to 10 min was investigated in the presence of  $\cdot$ , 1 M electrolyte concentration by using cyclic voltammetry (CV) technique. Results showed the electrodeposition time affects the morphology and electrochemical properties of the electrodes. The specific capacitance of the electrodes, calculated from CV curves determined that the prepared electrode with deposition time of 1 min shows highest specific capacitance of  $\uparrow$ 1 r  $Fg^{-1}$ , at  $\uparrow \cdot mVs^{-1}$  scan rate.

Keywords: Supercapacitors, MnO<sub>1</sub>, Electrodeposition.

انرژی با چگالی انرژی و همچنین چگالی توان بالا شده است [۱-۴]. ابرخازنها به دلیل ویژگیهای منحصر بهفرد نظیر چرخهی طولانی، چگالی توان بالا و فرآیند شارژ-دشارژ سریع توجه

مقدمه در دهههای اخیر، کاهش سوختهای فسیلی و افزایش آلودگیهای زیستمحیطی منجر به توسعه و بهبود دستگاههای ذخیه سازی ڎٳؿڲٳڋ بيهييني بهيينيي

> ویژه ای را در میان تمام دستگاه های ذخیره سازی انرژی به خود جلب کرده اند [۵، ۶]. با توجه به سازو کار ذخیره انرژی، ابرخازن ها را می توان به شبه خازن ها و خازن های الکتریکی دولایه (EDLC) تقسیم بندی کرد. شبه خازن ها که معمولاً از اکسیدهای فلزات واسطه و پلیمرهای رسانا تشکیل شده انه، می توانند انرژی را از طریق واکنش های اکسایش/کاهش ذخیره کنند در حالی که EDLC هایی که بر اساس مواد کربنی هستند، بارها را به صورت الکترواستاتیک در سطح مشترک الکترود/الکترولیت جذب می کنند [۶–۷].

> موادی که الکترود را تشکیل میدهند، یکی از اجزای مهمی است که بر عملکرد ابرخازن ها تأثیر میگذارنـد. بنـابراین، توسـعه مـواد الکترودی یک چالش مهم برای بررسی ابرخازنهای با کارایی بـالا است.

> دی اکسید منگنز (،MnO) به دلیل ظرفیت ویژه نظری بالا، برگشت پذیری بالا، و غیر سمی بودن، یک نامزد مطلوب برای ابرخازن است. عیوب ساختاری، ترکیبات شیمیایی، ریختشناسی ، تخلخل و بافت میتوانند بر رفتار الکتروشیمیایی ،MnO تأثیر بگذارند [۷]. با این حال، ،MnO به طور متعارف تهیه شده نشان دهنده قابلیت سرعت کم و همچنین مساحت سطح ویژه کم است، بهینه سازی روش مناسب برای تهیه نانوساختارهای ،MnO می تواند به طور قابل توجهی سطح ویژه و قابلیت سرعت بالا را افزایش دهد [۹].

> در سال های اخیر، روش های مختلفی از جمله گرمایی، رسوب بخار شیمیایی (CVD)، بخار-مایع-جامد (VLS)، و سنتز به کمک الگو برای تهیه نانوساختارهای مختلف ۲۰Mn مورد استفاده قرار گرفته است [۷، ۱۰]. در میان همه، رسوب الکتروشیمیایی مقرون به صرفهترین روش با دقت کنترل بالا بر پارامترهای رسوب، توانایی تنظیم جریان و پتانسیل اعمال شده، سرعت رسوب سریع، بدون قالب و مقرون به صرفه است. رسوب در دما و فشار اتاق نیز یک شرایط مفید است [۱۱].

> از آنجایی که ضخامت لایه با زمان رسوب گذاری نسبت معکـوس دارد، زمان رسـوب کمتـر، از ایجـاد لایـه هـای متـراکم و ضـخیم MnO<sub>r</sub> جلوگیری می کند و لایه متخلخل ایجاد می شود.

در طول فرآیند رسوب الکترونی، بهبود ریختشناسی، ویژگیهای متالوئیدی و هدایت الکتریکی از نظر جنبشی برای انتقال سریع الکترون مطلوب تر است [۱۲]. در این مطالعه، نانوساختارهای MnO<sub>7</sub> بر روی فوم نیکل در زمانهای مختلف رسوب الکتریکی ۱، ۲، ۳، ۷، ۱۰ و ۱۵ دقیقه در غلظت الکترولیت ۱/۰ مولار قرار گرفتند. سپس الکترودهای تهیهشده از نظر ویژگیهای ابرخازن مانند ظرفیت ویژه ابرخازن مورد ارزیابی قرار گرفتند. الکترود تهیه شده در زمان رسوب ۱ دقیقه، بهترین ظرفیت خازنی را در مقایسه با سایر الکترودها از خود نشان داد.

## روشهای آزمایشگاهی تهیه الکترودهای ،MnO

آماده سازی الکترودها در سیستم دو الکترودی تحت شرایط پتانسیواستات انجام شد. نانوساختارهای ۲۸۸۰ بر روی فوم نیکل تمیز شده در الکترولیت آبی ۰/۱ مولار ۲۸۸۰ با استفاده از روش رسوب الکتریکی کاتدی در پتانسیل ثابت ۱۰ ولت در زمان-های ۱، ۲، ۳، ۷، ۱۰ و ۱۵ دقیقه لایهنشانی شدند. الکترودها پس از شستشو در ۱۰۰ درجه سانتیگراد خشک و با نماد M-X نامگذاری شدند که در آن X نشان دهنده زمان رسوب الکترولیت است. جرم بارگذاری شده بر روی الکترودها از محاسبه اختلاف وزن بین نمونه های آماده شده قبل و بعد از پوشش محاسبه شد. جرم بارگذاری مواد فعال بین ۵/۰ تا ۶/۵ میلی گرم بر سانتی متر مربع بدست آمد.

## بحث و نتیجهگیری

الگوهای XRD نانوپودر ۲۰۸۰ (خراشیده شده از سطح الکترود)، و همچنین الکترودهای ۱-۸۸، ۲۰ و ۳-۸ در شکل ۱–الف نشان داده شده است. برخی از پیک های پراش گسترده با شدت کم در ۲۶٫۷ درجه، ۲۸٫۸ درجه، ۳۸٫۷۹ درجه و ۶۶ درجه وجود دارد که به ترتیب مربوط به صفحات (۲۲۰)، (۳۱۰)، (۳۰۰) و (۰۰۰) فاز کریستالی ۲۰۵۲ هستند(۲۱۰۱)، (۲۲۰) و (۲۰۰) فاز وسیع نشان میدهد که بلورینگی ۲۸٫۵ ضعیف است [۱۳]. مشخص شده است که سطح تبلور پایین، عملکرد الکتروشیمیایی را به دلیل افزایش دسترسی و نفوذ یونهای الکترولیت از طریق



الکترود افزایش میدهد [۱۴] بنابراین، مکانهای واکنش اکسایش/کاهش بیشتری در دسترس یونهای الکترولیت قرار می گیرند [۱۳، ۱۴و ۱۵].



شکل ۱: الف- طیف XRD نمونههای پودر و الکترودهای M-۱، ۲۰M و M-۳ تهیه شده از MnO<sub>۲</sub>، ب- طیف FT-IR پودر MnO<sub>۲</sub>، ج طیف رامان M-۱، ۲۰M و M-۲

شکل ۱-ب طیف FT-IR نانو پودر MnO<sub>۲</sub> را در محدوده عدد موج ۴۰۰۰-۲۰۰ شان میدهد. دره واقع در محدودهی ۰۴۰۰ MnO<sub>۲</sub> به حالت ارتعاشی کششی Mn-O از MnO<sub>۲</sub> از اختصاص داده می شود در حالی که نوارهای ارتعاشی در <sup>۲۰</sup> cm ۱۶۳۶ می توانند به حالت OH-Mn سایتهای هشت وجهی ،MnO نسبت داده شوند [۲۳]. ارتعاش در اطراف ۳۴۰۰ cm مربوط به حالت ارتعاش OH-H<sub>r</sub>O است. شکل ۱–ج طیف رامان را برای الکترودهای M-۱٫۲٬۳، نشان می دهد. برای الکترود نمونه MnO، زا می توان به ارتعاش کششی Mn-O از Mn-O از MnO، نسبت داد. قلهی واقع در ۶۴۵ که در همه نمونهها دیده می شود، به ارتعاشات کششی متقارن ،MnO از MnO اختصاص داده می شود [۱۷، ۱۴]. ریختشناسی سطح الکترودهای آماده شده توسط -FE SEM مشخص شد. همانطور که در شکل ۲ نشان داده شده است، نانوساختارهای MnO<sub>r</sub> تهیه شده در الکترولیت ۰/۱ مولار به خوبی بر روی فوم نیکل با ضخامتهای مختلف به دلیل زمان رسوب گذاری، رسوب می کنند و هر چه زمان رسوب گذاری بیشتر باشد، ضخامت بالاتری دارد. شکل ۲الف-ب الکترودهای M-۱ را در بزرگنمای های مختلف نشان میدهد. همانطور که در شکل

۲ج-د نشان داده شده است، تصاویر M-۲ برخی از نانولایههای لایه نشانی شده متصل به یکدیگر را نشان میدهند. ساختار مشابهی روی الکترود M-۳ دیده می شود (شکل ۲-و).



شكل ٢: تصاوير FE-SEM، الف-ب:١-M، ج-د: ٢-M، ه-و: M-۳

رفتار الکتروشیمیایی الکترودهای آماده شده با استفاده از سیستم سه الکترودی به منظور بررسی اثر زمان رسوب و غلظت الکترولیت بر عملکرد ذخیره انرژی ارزیابی شد.

ظرفیت ویژه متناظر الکترودهای (M-x (x=۱–۱۵، از منحنیهای CV (۳ الف) محاسبه و در جدول ۱ فهرست شده است.

نتایج نشان می دهد الکترود تهیه شده در زمان رسوب ۱ دقیقه (-M ۱) بالاترین ظرفیت ویژه جرمی معادل <sup>۲</sup>-Fg ۲۱۴ را با سرعت اسکن <sup>۲</sup>-mVs ۲۰ نشان می دهد. مقدار ظرفیت ویژه به ترتیب به ۱۳۵۶، ۱۲۵/۶، ۲۱/۱۰ را ۱۲/۱ و ۹/۹ <sup>۲</sup>-Fg برای الکترودهای رسوب شده در ۲، ۳، ۷، ۱۰ و ۱۵ دقیقه کاهش می یابد. این را می توان به



بسیار خوب <sup>(-</sup> ۲۱۴ Fg) ۲۱۴ ((- ۱۴۰/۸ Fg) در <sup>(-</sup> MVs) ۲۰ ((- ۱ Ag) مرعت اسکن (چگالی جریان) برای الکترود تهیه شده در زمان رسوب ۱ دقیقه در غلظت الکترولیت ۰/۱ مولار به دست آمد.

مرجعها

[1]. Ragupathi, V., P. Panigrahi, and N. Ganapathi Subramaniam, g- $C^{TN} \notin$  doped MnS as high performance electrode material for supercapacitor application. Materials Letters,  $\Upsilon \cdot \Upsilon \circ$ ,  $\Lambda \cdot \Upsilon \circ$ .

[Y]. Saravanakumar, B., T.H. Ko, and B.-S. Kim, Rational design of binder-free ZnCo  $O^{\epsilon}$  and Fe  $O^{r}$  decorated porous D Ni as high-performance electrodes for asymmetric supercapacitor. Ceramics International, Y-VA.  $\varepsilon \varepsilon (\Lambda)$ : p.  $V \cdot V \varepsilon - V \cdot U \varepsilon$ .

[<sup>r</sup>]. Miller, J.R. and P. Simon, *Electrochemical Capacitors for Energy* Management. Science, Y...A. TY1(OAA9): p. TO1-TOY.

[ $\mathfrak{t}$ ]. Jiang, Y., et al., In situ growth of (NH  $\mathfrak{t}$ )  $\mathsf{VV} \mathfrak{I} \circ \mathcal{OY} \circ \mathcal{AHYO}$  urchin-like hierarchical arrays as superior electrodes for all-solid-state supercapacitors. Journal of Materials Chemistry A,  $\mathsf{Y} \cdot \mathsf{IA}$ ,  $\mathsf{I}(\mathsf{P}\mathfrak{t})$ : p.  $\mathsf{IT} \cdot \mathsf{A} \cdot \mathsf{IITIo}$ .

[°]. Yu, L. and G. Chen, *Redox electrode materials for supercapatteries. Journal of Power Sources*, Y.VI, YYI: p. J. £-JIY.

[1]. Yang, W., et al., Facile synthesis of nitrogen-doped porous carbon for high-performance supercapacitors. RSC Advances, Y·IV. V(AV): p. ooYoV\_ooYIV.

[Y]. Li, W., et al.,  $MnO^{\gamma}$  Nanoflower Arrays with High Rate Capability for Flexible Supercapacitors. ChemElectroChem,  $\gamma \cdot \gamma \cdot \gamma \cdot \gamma \cdot \gamma \cdot \gamma \cdot \gamma \cdot \gamma$ .

[A]. Wu, Y.Z., et al., Hydrothermal synthesis of Fe  ${}^{r}O$   $\epsilon$  nanorods/graphitic C  ${}^{r}N$   $\epsilon$  composite with enhanced supercapacitive performance. Materials Letters, Y.VY. 19A: p. 112-11Y.

[ $^{9}$ ]. Ji, C., H. Ren, and S. Yang, Control of manganese dioxide crystallographic structure in the redox reaction between graphene and permanganate ions and their electrochemical performance. RSC Advances, Y. 10. o(YA): p. Y19VA-Y19AV.

[11]. Awasthi, S., et al., Progress in Electrochemical and Electrophoretic Deposition of Nickel with Carbonaceous Allotropes: A Review. Advanced Materials Interfaces,  $\Upsilon \cdot \Upsilon \cdot$ 

[17]. Shu, D., et al., Enhanced Capacitance and Rate Capability of Nanocrystalline VN as Electrode Materials for Supercapacitors. International Journal of Electrochemical Science,  $\Upsilon \cdot \Upsilon \cdot \Lambda$ ; p.  $\Upsilon \cdot \Lambda$ : p.  $\Upsilon \cdot \Lambda$ : [17]. Zarshad, N., et al., MnO  $\Upsilon$  nanospheres electrode composed of low

crystalline ultra-thin nanosheets for high performance and high rate supercapacitors. Materials Science and Engineering: B,  $r \cdot r \cdot$ ,  $r \circ r$ : p. 11271.

[11]. Yan, L., et al., Modulating the electronic structure and pseudocapacitance of  $\delta$ -MnO<sup>+</sup> through transitional metal M (M = Fe, Co and Ni) doping. Electrochimica Acta, Y · 19.  $\Upsilon$  · 1. P.  $\circ$  Y 9.  $\circ$ 

[1°]. Hao, J., et al., A low crystallinity oxygen-vacancy-rich Co<sup>TO</sup> <sup> $\varepsilon$ </sup> cathode for high-performance flexible asymmetric supercapacitors. Journal of Materials Chemistry A, <sup>T</sup> (TT): p. 17.96-171...

[11]. Yin, B., et al., Phase-controlled synthesis of polymorphic MnO<sup> $\tau$ </sup> structures for electrochemical energy storage. Journal of Materials Chemistry A, <sup> $\tau$ </sup> <sup> $\cdot$ </sup>

[ $^{Y}$ ] .Morgan Chan, Z., et al., *Electrochemical trapping of metastable*  $Mn^{r_{+}}$ *ions for activation of*  $MnO_r$  *oxygen evolution catalysts*. Proceedings of the National Academy of Sciences,  $^{Y+1A}$ .  $^{YO}(^{YT})$ : p. E $^{OYTI-EOYTIA}$ .

تسهیل انتشار، ورود و خروج یونهای الکترولیت در طی واکنش-های الکتروشیمیایی نسبت داد. در زمانهای مختلف رسوب گذاری، بازده ذخیره سازی الکترودها به دلیل تفاوت در ساختار و ریختشناسی آنها تغییر می کند.

حسب CV	M-x (x=۱− ۲ بر	الكترودهاي (۱۵	ظرفيت ويژه	دول شماره ۱:
--------	----------------	----------------	------------	--------------

الكترود	$C_{\rm F} (Fg^{-1})$ at $1 \cdot$ mVs <sup>-1</sup>	$C_{F} (Fg^{-1}) at$ $\Upsilon \cdot$ $mVs^{-1}$	$C_{\rm F}$ ( Fg <sup>-1</sup> ) at $\Delta \cdot$ mVs <sup>-1</sup>	$C_{F}$ ( Fg <sup>-1</sup> ) at $\Lambda \cdot$ mVs <sup>-1</sup>	$C_{F}(Fg^{-1}) at$ $1 \cdot \cdot$ $mVs^{-1}$
۰,۱-M -۱	۲۱۳,۲	714,0 7	108,A 1	141,A 8	189,9 r
۰,۱-M -۲	۲, ۱۴۰ ۳	۱۲۵,۶ ۵	٩٩,٢١	۸۷,۷۸	۸۲,۷۲
۰,۱-M -۳	۸۸,۲	۷۱٫۸۱	۵۳,۱۶	40,88	47,77
۰,۱-M -۷	-	۲۷,۰۶	-	-	-
۰,۱-M-۱۰	-	17,19	-	-	-
۰,۱-M-۱۵	-	٩,٩	-	-	-
۰,۰۱-M-۱	۸١,٩۵	۹۰,۶۳	۸۸,۵۲	90,88	٨٩,٢١

شکل ۳ ب، منحنیهای GCD برای الکترود (M-x (x=۱–۱۵، را

نشان میدهد که در توافق با منحنی CV هستند.



## نتيجه گيرى

در این پژوهش از روش رسوب الکتریکی ساده و کم هزینه برای سنتز ۲۰۸۸ به عنوان ماده الکترود ابرخازن به منظور ارزیابی عملکرد الکتروشیمیایی (خازن خاص) استفاده شده است. رسوب الکتروشیمیایی در زمان های مختلف ۱، ۲، ۳، ۵، ۷، ۱۰ و ۱۵ دقیقه و غلظت ۰/۱ مولار در الکترولیت آبی ۲۰۸۳ انجام شد. نتایج نشان داد که زمان رسوب الکتروشیمیایی بر ریزساختار و عملکرد الکتروشیمیایی اکسیدهای منگنز تأثیر معناداری دارد. ظرفیت ویژه



مقدمه

## بررسی و مقایسه ویژگی های نوری دو فاز متداول بتا و گاما نیمرسانای InSe با سه فاز جدید دلتا، امگا و فی: محاسبات اصول اولیه

مجيديان سرمزده، مسعودا ؛ ولي، رشيدا

دانشکده فیزیک، دانشگاه دامغان، دامغان، ایران

## چکیدہ

در این مقاله با استفاده از نظریه تابعی چگالی برخی از ویژگیهای نوری سه فاز جدید دلتا، امگا و فی InSe بررسی و با فازهای بتا و گاما مقایسه شده است. نتایج ما نشان می دهد که ثابت دی الکتریک برای تمامی فازها در راستای برون صفحه ای از مقدار ثابت دی الکتریک در راستای درون صفحه ای بزرگتر است. بررسی ها نشان می دهد که ضریب شکست استاتیک در فازهای جدید افزایش قابل توجهی نسبت به فاز بتا داشته اند. دو شکستی برای فازهای جدید InSe در دامنه انرژی نور مرئی از دو شکستی فاز بتا بزرگتر و حتی بهتر از دو شکستی بلورهای دو شکستی تجاری متداول است. مقادیر به دست آمده برای نمایه بخش حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک و ضریب شکست استاتیک برای فازهای بتا و گاما به مقادیر نظری و تجربی گزارش شده نزدیک است. و ازههای کلیدی: ویژگیهای ایتیکی، نیمرسانای InSe، دو شکستی، نظریه تابعی چگالی

### Investigation and comparison of optical properties of two common phases of beta and gamma InSe semiconductor with three new phases of Delta, Omega and Phi: First principles calculations Maiidiyan Sarmazdeh, Masoud': Vali, Rashid'

<sup>1</sup> School of Physics, Damghan University, Damghan, Iran

In this paper, some of the optical properties of the InSe in three new phases of the Delta, Omega, and Phi are investigated and compared with the beta and gamma phases. Our results show that the dielectric constant for all phases in the out-plane direction is greater than the dielectric constant in the in-plane direction. The results show that the static refractive index in the new phases has significantly increased compared to the beta phase. Birefringence for new InSe phases in the visible light energy range is larger than the beta phase birefringence and better than conventional commercial birefringence crystals. The profile of the real and imaginary parts of the dielectric function and values of the static refractive index obtained for the beta and gamma phases are close to the reported theoretical and experimental values.

*Keywords*: Optical properties, InSe semiconductor, Birefringence, Density functional theory PACS No. 78

۲.۱eV افزایش مییابد[۱]. تا به امروز بر اساس چیدمان مشاهده شده از ساختار تک لایهای InSe با گروه فضایی م<sub>3</sub>d سه ساختار حجمی در فازهای بتا، گاما و اپسیلون به ترتیب با گروهای فضایی R3m .P63/mmc و P6-m2 گزارش شده است[۱]. اخیراً سان و همکارانش در بررسیهای نظری خود نشان دادند که برای ساختار لایهای InSe یک ساختار تک لایهای با تقارن <sub>2</sub>d وجود دارد که از لحاظ ترمودینامیکی، دینامیکی، جنبشی و گرمایی پایدار است. سپس این گروه نشان دادند که با چینش این ساختار لایهای سه ساختار

نیمرساناهای واندروالسی لایهای با تحرکپذیری الکترونی بالا و گاف انرژی قابل تنظیم، ساختارهای بسیار مناسبی برای استفاده در اپتوالکترونیک و الکترونیک مقیاس نانو هستند. در میان نیمرساناهای لایهای، InSe بالاترین تحرکپذیری الکترونی در دمای اتاق را داراست که ناشی از جرم موثر الکترونی نسبتاً کوچک نوار هدایت آن است[۱]. علاوه بر این، گاف انرژی InSe در حالت حجمی حدود ۱.۲eV ڭانتىڭان بىلىنىيى

> حجمی دیگر با نام گذاری دلتا، امگا و فی وجود دارد که این ساختارها نیز از همه لحاظ پایدار هستند و قابلیت سنتز دارند[۱]. عمده کار این گروه بر روی ویژگیهای الکترونی بوده است. در این مقاله سعی شده است برخی ویژگیهای نوری این سه فاز جدید از InSe مورد بررسی قرار گیرد و با فازهای متداول بتا و گاما مقایسه شود.

## روش انجام محاسبات

محاسبات به روش امواج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از بسته محاسباتی WIEN2k انجام شده است [۲]. برای بررسی دقیقتر خواص اپتیکی برای جمله پتانسیل همبستگی-تبادلی، از پتانسیل بک-جانسون اصلاح شده (GGA) استفاده شده است [۳و٤]. مقدار انرژی جدایی بین حالتهای مغزی و ظرفیت، است [۳و٤]. مقدار انرژی جدایی بین حالتهای مغزی و ظرفیت، در اولین منطقه بریلوئن برابر ۲۰۰۰ نقطه در نظر گرفته شده است. معیار همگرایی برای خودسازگاری به گونهای انتخاب شده که اگر و اختلاف انرژی RNT بین دو چرخه متوالی کمتر از ۹ ۲۰۰۱ و اختلاف انرژی RN بینه شده عدوالی کمتر از ۹ ۲۰۰۱ و اختلاف انرژی یا بار بین دو چرخه متوالی کمتر از ۹ ۲۰۰۱ و اختلاف انرژی یا در بایند، چرخه متوالی کمتر از ۲۰۰۰ محاسبات بر روی ساختار بهینه شده عدا انجام شده است. محاسبات بر روی ساختار بهینه شده می مداول  $\beta$  و  $\gamma$  و سه فاز جدید  $\delta$ ،  $\delta$  و  $\phi$  به ترتیب با گروههای فضایی متداول  $\beta$  و  $\gamma$  و سه فاز جدید  $\delta$ ،  $\delta$  و ثنان داده شده است.



شکل ۱: ساختار InSe درفازهای الف)بتا، ب)گاما،ج)دلتا، د)امگا و ه)فی

## بحث و نتايج

تغییرات قسمت حقیقی تابع دی الکتریک  $(\varpi)_1$ در فازهای بتا تا فی بر حسب انرژی فوتون فرودی در تابش نرمال در جهت درون صفحهای (ds یا x) و عمود بر صفحه (c یا z) در شکل ۲ آورده شده است. مقادیر ثابت دی الکتریک در دو راستا برای فازهای مختلف در جدول ۱ گزارش شده است. مقادیر ثابت دی الکتریک برای فازهای معمول بتا و گاما در تطابق خوبی با نتایج نظری و تجربی در دسترس است[۵-۱۰]. بررسی ثابت دی الکتریک نشان می دهد که اولاً ثابت دی الکتریک برای تمامی فازها در راستای برون مفحهای از مقدار ثابت دی الکتریک در راستای درون صفحهای فازهای جدید نسبت به فازهای معمول بزرگتر است ولی این اختلاف در فازهای جدید نسبت به فازهای معمول مقرار تاب نزدیکتر است. بررسی  $(\varpi)_1$  در راستای درون صفحهای در نزدیکتر است. برای این این ایک در راستای در دو راستا برای معمول بزرگتر است ولی این

جدول ۱: ثابت دیالکتریک استاتیک، ضریب شکست استاتیک و بیشینه ضریب شکست در فازهای مختلف InSe. مقادیر تجربی در پرانتز گزارش شده است.

فاز	بتا	گاما	دلتا	امگا	فى	
	٦.٤٦(٦.٤٠)	٧.٠١ (٧.٨٠)	7 47	7.44	7 ( 7	
$\mathcal{E}_{0x}$	[^]	[٩]		()/0		
G	V.T. (V.0T)	٨.١٧ (٨.٩)	A \ A		X XA	
$\mathcal{E}_{0z}$	[\•]	[٩]	A.1A	N.•N	*.*0	
<i>n</i> <sub>0x</sub>	1.02 (7.07)	7.70 (7.79)	* 74	2 4 2	۲.٥٨	
	[^]	[٩]	1.12	1.11		
<i>n</i> <sub>0z</sub>	۲.٦٦ (۲.٦٤)	1.17 (1.97)	۲۸٦	7 . (	¥ 1/4	
	[Y]	[٩]	1777	1.72	1.07	
max	٣.٦٩	٣.٦٩	٣.٦٩	٣.٦٩	۳.٦٩	
$n_x$	@£.\0eV	@٤.١0eV	@£.\0eV	@£.10eV	@£.\0eV	
$n_z^{\max}$	٣.٦٩	٣.٦٩	٣.٦٩	٣.٦٩	٣.٦٩	
	@£.\0eV	@£.10eV	@£.10eV	@£.10eV	@£.\0eV	

در شکل ۳ تغییرات قسمت موهومی تابع دی الکتریک  $(\varpi)_2 s_2 c_2$  در فازهای بتا تا فی بر حسب انرژی فوتون فرودی نشان داده شده است. قلههای  $(\varpi)_2 s_2$ به فرایند جذب مربوط می شوند. برای قطبش درون صفحهای بررسی  $(\varpi)_2 s_2$  نشان می دهد که برای تمامی فازها، قلههای A B و C در یک محدوده انرژی (به ترتیب در حدود گه ۳۸eV ٤.۲eV و ٤.9eV) رخ می دهند.



قله پر شدت D در فازهای بتا و گاما دیده نمی شود و این درحالی است که شدت قله F در ساختارهای دلتا، امگا و فی نسبت به قله E کاهش یافته و به سمت انرژیهای بالاتر منتقل شده است. قسمت موهومی تابع دیالکتریک در فازهای بتا و گاما با مقادیر تجربی در دسترس مقایسه شده است. علاوه بر اینکه نمایه (۵) دع به دست آمده مشابه مقادیر تجربی است، قلههای  $\varepsilon_2(\omega)$  به ساختار ایتیکی در ٤.٣eV، ۳.٥eV و ٧eV نزدیک و در تطابق خوبی با مقادیر تجربی است[٥-١٠]. برای قطبش برون صفحهای مشاهده می شود که قله C در فازهای دلتا، امگا و فی نسبت به فاز بتا و گاما از شدت بیشتری برخوردار است و علاوه بر آن اندکی به سمت انرژیهای بالاتر منتقل شده است. همچنین قله D در فازهای جدید از شدت کمتری نسبت به فازهای متداول InSe برخوردار است. پاشندگی ضریب شکست برای فازهای مختلف InSe بر حسب انرژی فوتون فرودی برای قطبش های درون صفحهای و برون صفحهای در شکل ٤ نشان داده شده است. بخش الكتروني ضريب شكست استاتيك به همراه بيشينه و کمینه ضریب شکست در جدول ۱ خلاصه شده است. کمترین مقدار ضريب شکست استاتيک مربوط به فاز بتا است و ضريب شکست استاتیک فازهای دلتا و گاما خیلی به هم نزدیک است. بررسی نشان میدهد که ضریب شکست استاتیک در فازهای جدید افزایش قابل توجهی نسبت به فاز بتا داشتهاند. مقدار ضریب شکست استاتیک به دست آمده برای فازهای بتا و گاما به مقادیر نظری و تجربی گزارش شده نزدیک است[۷-۹]. با افزایش انرژی فوتون فرودي ضريب شكست افزايش مي يابد و سيس به بيشينه مقدار خود می رسد. بر اساس جدول ۱ بیشینه ضریب شکست در فازهای بتا و گاما بزرگتر از فازهای جدید InSe است و در انرژی بالاتری نسبت به این فازها رخ میدهد. بعد از بیشینه، ضریب شکست با افزایش انرژی فوتون فرودی کاهش مییابد و در برخی از بازههای انرژی مقدار ضریب شکست کمتر از یک می شود. در بازه انرژی که ضریب شکست یک محیط پاشنده کوچکتر از یک است، سرعت گروه به سمت دامنه منفى شيفت پيدا ميكند و طبيعت ماده پاشنده از خطي به غیر خطی تغییر پیدا می کند[۱۱]. برای فازهای بتا و گاما در قطبش درون صفحهای انرژی که  $n(\omega) < 1$  است در حدود ۷.۵۰eV است





ت انرژی فوتون فرودی الف)راستای درون صفحهای و ب)راستای برون صفحهای



که به مقدار مشاهده شده در کار چوی و همکارانش همخوانی خوبی دارد[۷].



شکل ٤: پاشندگی ضریب شکست فازهای InSe بر حسب انرژی فوتون فرودی الف)راستای درون صفحهای و ب)راستای برون صفحهای



شکل۵: . تغییرات دوشکستی فازهای InSe در بازه انرژی صفر تا ۱۶eV برای فازهای جدید InSe شرط 1> (۵) مدر محدوده انرژی ۲.۵eV و ۸.۵eV واقع شده است که بعد از ۸.۵eV ضریب شکست کاملاً زیر یک قرار می گیرد. این مقدار انرژی حدود ۱eV بزرگتر از فازهای بتا و گاما است. برای قطبش برون صفحهای شرط 1> (۵) مدر سه انرژی ۷.۱۰eV، ۷.۱۰eV و ۹.۲۵eV برای فازهای بتا و گاما و

است. تغییرات دوشکستی فازهای مختلف InSe در بازه انرژی صفر تا ۱٤eV در شکل ٥ نشان داده شده است. همان طور که می دانیم مواد دوشکستی به صورت گسترده به عنوان ادوات قطبشی مورد استفاده قرار می گیرند و یک نقش کلیدی در مولفههای ایتیکی و قطعات نوری خطی و غیر خطی دارند. همان طور که در شکل ٥ دیده می شود، دوشکستی برای فازهای جدید InSe در دامنه انرژی نور مرئی از دوشکستی فاز بتا بزرگتر و حتی بهتر از دوشکستی YVO<sub>4</sub> مانند دوشكستي تجارى متداولي بلورهاي (0.204@532nm) است[۱۲]. در سال ۲۰۱۸ سگورا وهمکارنش [۱۲] نشان دادند که h-BN یک دوشکستی منفی بزرگ در دامنه نور مادون قرمز تا فرابنفش دارد. نتایج ما نشان میدهد که دوشکستی فازهای InSe در دامنه انرژی ۳.۵eV تا eV از دوشکستی h-BN بزرگتر و بهتر است.

## نتيجه گيري

در این مقاله بر اساس نظریه تابعی چگالی، برخی ویژگیهای نوری فازهای متداول و جدید InSe مورد بررسی قرار گرفت. نتایج ما نشان میدهد که افزایش قابل مشاهدهای در ثابت دیالکتریک نسبت به فاز بتا وجود دارد. نمایه تابع دیالکتریک به دست آمده برای فازهای بتا و گاما در تطابق خوبی با مقادیر تجربی است. ضریب شکست استاتیک در فازهای جدید افزایش قابل توجهی نسبت به فاز بتا داشتهاند. مقدار ضریب شکست استاتیک به دست آمده برای فازهای بتا و گاما به مقادیر نظری و تجربی گزارش شده نزدیک است. دوشکستی برای فازهای جدید اعتر از دوشکستی نور مرئی از دوشکستی فاز بتا بزرگتر و حتی بهتر از دوشکستی بلورهای دوشکستی تجاری متداول است که می تواند کاربرد جدیدی را در ادوات نوری دوشکستی فراهم کند.

### مرجعها

- [1] Sun, Yuanhui, et al. Advanced functional materials 30 (2020) 2001920.
- [2] W. Kohn et al., The Journal of Physical Chemistry 100 (1996) 12974.
- [3] P. Blaha et al., Computer Physics Communications 147 (2002) 71-76.
- [4] F. Tran et al., *Physical review letters* **102**, No.22 (2009) 226401.
- [5] V.Grasso et al., Solid State Communications 21, no. 3 (1977) 323-325.
- [6] R. Mamy et al., Solid State Communications **32**, no. 11 (1979)1129.
- [7] S.G. Choi et al., *Applied Physics Letters* **96**, no. 18 (2010) 181902.
- [8] A. Politano et al., *Scientific reports* 7, no. 1 (2017) 1-11.
- [9] N. Kuroda et al., *Solid State Communications* **34**, no. 6 (1980) 481-484.
- [10] D. Errandonea et al., *Physical Review B* **60**, no. 23 (1999) 15866.
- [11] L.J Wang et al., *Nature* **411**, no. 6840 (2001) 974-974.
- [12] A. Segura et al., Physical Review Materials 2, no. 2 (2018) 024001.





## بررسی نقش اکسیدگرافن برروی خواص حسگری حسگر گاز هیدروژن مبتنی بر فریت کبالت

محمودی، مهدیه ؛ کاملی، پرویز ؛ رنجبر، مهدی د انشکده فیزیک د انشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان ۱۳۱۱۸–۸۴۱۵۶

چکیدہ

دراین پژوهش به بررسی ویژگی های حسگرگازی هیدروژن مبتنی برفریت کبالت تهیه شده به روش خوداحتراقی وفریت کبالت ترکیب شده بامقدار۵/۰درصدوزنی،اکسیدگرافن پرداخته-ایم.بااستفاده ازتحلیل پراش پرتوایکس(XRD)دریافتیم که فاز ماده مطابق باکارت استاندارد فریت کبالت(ICDD:96-901-1149)به درستی تشکیل شدوهمچنین بااستفاده از سنجش حسگری گاز، مشاهده شد که نمونه ی ترکیب شده پاسخ بهتری نسبت به نمونه ی خالص دربرابر تزریق مشاهده شد که نمونه ی ترکیب شده پاسخ بهتری نسبت به نمونه ی خالص دربرابر واژه های کلیدی:حسگرگازی، فریت کبالت، خوداحتراقی، اکسیدگرافن، هیدروژن

## Research on the role of Graphene oxide (GO) on sensing properties of CoFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, H<sub>2</sub> gas sensor

#### Mahmoodi, mahdiye; Kameli, Parviz; Ranjbar, mehdi

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

### Abstract

In this study, the characteristics of Hydrogen gas sensor based on Cobalt Ferrite samples prepared by the Selfcombustion method and composite with .5%wt, Graphene Oxide, were investigated. Using XRD analysis, we found that the material phase was correctly formed according to the cobalt ferrite standard card (ICDD:96-901-1149) and using sensory test, was observed that composite sample has a better response than the pure sample against the injection of 5000 ppm Hydrogen gas in 350°C.

Keywords: gas sensor, cobalt ferrite, Self-combustion, graphene oxide, Hydrogen

PACS No. 51

نگرانی هایی پیرامون مسائل ایمنی تولید،ذخیره سازی ،حمل و نقل واستفاده از این گاز شده است و به خوبی بیانگراهمیت تشخیص نشت میدروژن درمقیاس <sup>(</sup>ppm و <sup>۲</sup>dpp در سیستم های هیدروژنی برای جلوگیری از هرگونه آسیب وضرر به انسان و زندگیاش میباشد[۲].

1 Parts-per-million

2 Parts-per-billion

مقدمه روندجهانی مصرف انرژی توسط صنایع مختلف خصوصاً خودروسازی به سمت منابع انرژی پاک تر و کارآمدتر سوق یافته است لذا استفاده از هیدروژن بعنوان یکی از منابع انرژی تجدیدپذیر و پاک مورد توجه زیادی قرار گرفته است[۱]. است[۱]. درنگ، باقابلیت اشتعال بالا(درغلظت رنگ، باقابلیت اشتعال بالا(درغلظت باابعادبسیارکوچک بوده که به راحتی میتوانداز مخازن هیدروژن نشت



سنجش گازها درحسگرهای گازی از طریق تغییرات درخواص مختلف آن از جمله؛ خــواص الكتريكــى، نــورى، جرمــى، مغناطیسی و... انجام میشود. ح سگرهای گازی نیم ر سانا قط عاتی ه ستندکه برای اندازه گیری غلظت گاز هدف ازتغی یر مقاو مت الکتری کی ب هره میبر ند.این نوع ح سگرها با ویـژگــی هـای کـوچکی ابعـاد ،سـبکی واســتفـاده آســان ،هزيـنــه ی پــايـين ، حساسیت بالا شناخته میشوند[۳]. در دهــههـای اخیـر بـدلیل خــواص منحصربفرد فريت ها ازجمله نسبت سطح به حجم بالا،مصاحت سطح ویژه ی بالا و تعداد جایگاه های فعال بید شتر ؛ تـلاشهای چشـمگیری در راسـتای تـوسـعه ح سگرهای گاز مبت نی بر فریت ها

انجام شده است[۴.] فریت های اسپینلی باهزینه ساخت کم میتوانند درزمینه ی حسگری حسا سیت ،گزینش پذیری وپایداری طولانی مدتی ارائه دهند. یافته های پژوهشی حاکی از آن است که ترکیب فریبت اسب پینل با نیکالیزور هایی مثل اکسید گرافن و نقاط کوانتومی گرافن در بهبود فعالیت فوتوکاتالیستی موثر بوده است. این ویژگیها آن را به یک نامزد ایده آل برای سنجش گاز نیر

## روش ساخت نمونه ها

تـبديـل كـرده است[۵و۴].

روش ساخت نمونه ی فریت کبالت خالص درایـــن مقالـــه،روش خــود احتراقی میباشـد؛ ابتدا ۲٬۸۷۳،گــرم نیتــرات کبالــت (CO(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>.6H<sub>2</sub>O) و ۹۹٬۶گـرم کبالــت (Fe(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>.9H<sub>2</sub>O) و ۹۹٬۶گـرم گلیسین (H<sub>2</sub>NCH<sub>2</sub>COOH) بـاترازویی بـا د قت ۱٬۰میدی گرم توزین شد و به ۰۷میدلی لیتر محلول اب مقطر اضافه شد سپس به مدت ۳۰دقید قه تو سط ه مزن مغناطیسی درد مای اتاق بصورت همگن نیتریک اسید رقیق شده (%65, 18NO) بـه ترکیب مذکور اضافه شد وم جددا به مدت ۲۰دقیقه درد مای اتاق روی همزن

کاملایکنوا خت شود. سپس محلول هم گن حاصـل تازمانیکـه آب محلـول تبخیر شود (که برای نمونه ی ما این زمان۴۳ساعت بود)روی همزن مغناطیسی دردمـای۸۵درجـه سـانتی گـراد ماندونهایتا ماده ای قرمز رنگ بدست امد که پس ازاسیاب کردن،پودر حاصل به مدت ۲ساعت درکوره دردمای۰۶۰درجه سانتی گراد بانرخ گرمایش۲درجه سانتی گراد بردقیقه(C/min) قرارگرفت ماندونه ی گ می نامیم) سیاه رنگ نمونه ی 8 می نامیم) سیاه رنگ کلسـینه شـده ای بـرای ساخت حسگراماده شد.

برای تهیه ی نمونه ی فریت کبا لت ترکیب شده با ۰/۵ درصد وزنی اکسـید گرافن ، ۱ میلی لیتر دی متیل فرمامید (N,N dimethyl formamide) به ۱میلی گرم از یودر اکـسیدگـرافـن تـهـیه شده بـه روش هامرز اضافه و سپس به منظور تهیه ی محلول ۱مولار همگن ،به مدت ۲ساعت در دستگاه حمام التراسونیک قرار داده شد و سپس ۰٬۲ گرم از پودر فریت كبالـــت بـدســت امــده از روش خــود احتراقی به محلول اضافه و مجددا بمنظور هم گن سازی به مدت ۶ ساعت درح مام الترا سونیک و سپس به مدت ۸ساعت روی گـرمکن بادمـای ۶۰درجـه سانتی گراد قرار داده شد ونهایـتا پودرنمونــــه ی ترکیـــب شـــده با۵/۰درصدوزنی اکسیدگرافان(که ان را نمونــه یSG مــینـامیم) بـرای سـاخت حسگراماده شد.

## بحث و بررسی

به منظور بررسی ساختار بلوری نمونه S تحلیل پراش پرتو ایکس برروی ان انجام شد و طبق شکل۱، طیف پراش نمونه در تطابق با استانداردفریت کبالت (ICDD:96-901-1149) قرار داشت.







شکل۱: طیف پراش پرتو ایکس نمونه

برای سنجش خواص حسگری نمونه ی S و SG مقدارمشخصی از محلول جداگانیه ی پودرحال شده ی نمونیه های میکروپیپت درایزوپروپانول توسط میکروپیپت برروی زیرلایه هایی از جنس آلومینا با اتصالاتی ازجنس طلا که روی زیر لایه با روش کندوپاش ایجاد شده است ریخته شد .

نـحوه چـیدمـان سنجش حـسگری گـازبـصورت طرحواره درشکل ۲رسم شده است.

نمونه داخل محفظه حسگر قرارگرفته وتست حسگری بصورت استاتیک انجام شد؛ بدین صورت که نمونه توسط گرمکن تحت د مای۲۵۰در جه سانتی گراد قرار گرفت و گاز هیدروژن با غلظت مرفعه شدو پس ازگذشت ۲۰۰ ثانیه گاز محفظه شدو پس ازگذشت ۱۰۰ ثانیه گاز بو سیله ی پمپ روتاری خارج و هوای بیرون واردمحفظه شد و بعلاوه در طول تمام مراحل حسگری تغییرات مقاومت اندازه گیری شد .



رفتار حسـگرS وSG بـه ازای غلظـت ۵۰۰۰ppmگـاز هیـدروژن در دمـای۳۵۰ در جه سانتی گراد برر سی و نـمودار تغییرات پا سخ انـها در شکل ۳ نـمایش داده شده است. پا سخ حسگرهای گاز باتوجه به رفتار ماده درشرایط مذکور از رابطه ی(۱)

S=(Rair-Rgas)/Rgas

())

محاسبه شده است که R<sub>air</sub> مقاومــت مـاده درحضور هـوا و R<sub>gas</sub> مقاومــت مـاده در حضور گازمی باشد. همانطورکــه مشـاهده میشودپاســخ استاتیک نمونه یSGنسبت به نمونه یS بهبودیافته است که این بهبود پاسخ ناشی از پیوند ناهمگون n-q بین فریت کبالت که نیم رسانای نـوعq واکسید گرافن که نوع میباشد؛است که کانال های حمل ونقل حا مل های متعددی را فراهم میکند که منجر به سایت های فعال تری برای جذب گاز میشود[۷].





نتیجه گیری دراین پژوهش حسگرگاز هیدروژن بر پایه نانو ذرات فریت کبالت خالص باروش خصوداحتراقی وفریصت کبالصت ترکیب شده با ۲۰۰در صدوزنی اکسید گرافن باموفقیت ساخته وموردبرر سی قرارگرفت.نتایج حاکی از این است که پاسخ حسگر گازی نانوذرات فریت پاسخ حسگر گازی نادوزرات فریت اکسید گرافن دربرابرتزریق۸۰۰در صدوزنی گازه یدروژن درد مای۳۵۰در جه سانتی گرادنسبت به حسگرگازی نانوذرات فریت کبالت بهبود میابد.

مرجعها

[1] Khandekar, M. S., N. L. Tarwal, I. S. Mulla, and S. S. Suryavanshi. "Nanocrystalline Ce doped CoFe2O4 as an acetone gas sensor." Ceramics International 40, no. 1 (2014): 447-452.

[2] De Oliveira, R. Cristina, RA Pontes Ribeiro, Guilherme Henrique Cruvinel, RA Ciola Amoresi, Maria Helena Carvalho, AJ Aparecido De Oliveira, M. Carvalho De Oliveira et al. "*Role of surfaces in the magnetic and ozone gas-sensing properties of ZnFe2O4 nanoparticles: theoretical and experimental insights.*" ACS Appl. Mater. Interfaces 13, no. 3 (2021): 4605-4617.

[3] Zhang, Jun, Xianghong Liu, Giovanni Neri, and Nicola Pinna. "Nanostructured materials for room-temperature gas sensors." Advanced materials 28, no. 5 (2016): 795-831.

[4] M. Torabi Goodarzi, M. Ranjbar. "Atmospheric flame vapor deposition of WO3 thin films for hydrogen detection with enhanced sensing characteristics, Ceramics International. "Volume 46, Issue 13,2020,Pages 21248-21255,ISSN 0272-8842.

[5] Mmelesi, Olga Kelebogile, Ngonidzashe Masunga, Alex Kuvarega, Thabo TI Nkambule, Bhekie B. Mamba, and Kebede K. Kefeni. "*Cobalt ferrite nanoparticles and nanocomposites: Photocatalytic, antimicrobial activity and toxicity in water treatment.*" Materials Science in Semiconductor Processing 123 (2021): 105523.

[6] Goodarzi, M. Torabi, and M. Ranjbar. "Atmospheric flame vapor deposition of WO3 thin films for hydrogen detection with enhanced sensing characteristics." Ceramics International 46, no. 13 (2020): 21248-21255.

[7] Bhati, Vijendra Singh, Sapana Ranwa, Saravanan Rajamani, Kusum Kumari, Ramesh Raliya, Pratim Biswas, and Mahesh Kumar. "*Improved sensitivity with low limit of detection of a hydrogen gas sensor based on rGO-loaded Ni-doped ZnO nanostructures.*" ACS applied materials & interfaces 10, no. 13 (2018): 11116-11124.



شکل ۳:پاسخ حسگرهای نمونهS و SG به ازای غلظت ۵۰۰۰ ppm گاز هیدروژن دردمای ۳۵۰درجه سانتی گراد

مکانیسم سـنجش گـاز نـمونـه ی SG بـا ییونـدهای نـاهمگون p-n درحضـور هـوا بدین شکل است که ازانجاییکه اکثریت حامل هـای جریـان در مـاده ی نـوع p حفره و نوعn الکترون است هنگامیکـه ایــن دومــاده یـیونــد بـرقـرارمـیکننــد درسطح مشترک، حفره ها از ماده ی نوع nبه nوالکترون هـا از مـاده ی نـوعn بـهp انتقال میابند ؛لذا بدلیل بـاز ترکیب حفرہ ہا ی نفوذی به مادہ ی نوع n، با الكترون ها ی آن وهمچنین الکترون های نفوذی به ماده ی نصوعp بـــاحفره هــای آن یــک لایــه ی تخلیه (اصطلاحا سدشاتکی) ایجاد میشود و نهایتا غلظت کل حاملها و نتیجتا جر یان الکتری کی کاهش ومقاو مت در هوا افزایش میابد واما با بارگذاری گازهیدروژن که گازی کاهـنده ا ست تعـدادی الکتـرون بــه نـوار رسـانش برميكرددوغلظت حاملها افزايش يافته واصطلاحا ارتفاع سدشاتكى كم ميشود و نتيج تا جر يان الكتريـ كى ا فزايش و مقاومــت درحضـور گـاز هدف(كاهنـده) كاهش مىابد[٧].





## چگالی ذخیره انرژی بزرگ در فروالکتریکهای بدون سرب BiFeO<sub>3</sub>-BaTiO<sub>3</sub>-KNbO<sub>3</sub>

## با پایداری حرارتی فوقالعاده خندابی، محمد؛ احمدوند، حسین

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

## چکیدہ

فروالکتریکهای بدون سرب BF و مرجب تبدیل نمونه از حالت فروالکتریک معمولی به حالت فروالکتریک واهلشی میشود. چگالی ذخیرهٔ انرژی قابل بازیافت جانشانی KN به جای BF موجب تبدیل نمونه از حالت فروالکتریک معمولی به حالت فروالکتریک واهلشی میشود. چگالی ذخیرهٔ انرژی قابل بازیافت Wrec=0.9J/cm<sup>3</sup> و بازدهٔ %83/ برای نمونهٔ واهلشی ( x=0.1) بهدست آمد. اندازه گیریهای پذیرفتاری الکتریکی نشان میدد نمونهٔ واهلشی از پایداری حرارتی بالایی برخوردار است. نتایج نشان میدهد که فروالکتریکهای بادون سرب BF-BT-xKN میتوانند در خازنهای توان پالسی نسل بعدی مورد استفاده قرار گیرند. واژه های کلیدی: BiFeO3 ذخیرهٔ انرژی، سرامیکهای بادون سرب ، فروالکتریک واهلشی ، پایداری حرارتی

# Large energy storage density in BiFeO<sub>3</sub>-BaTiO<sub>3</sub>-KNbO<sub>3</sub> lead-free ferroelectrics with super thermal stability

#### Khondabi, Mohammad; Ahmadvand, Hossein

Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan

#### Abstract

Lead-free ferroelectrics  $(0.67-x)BiFeO_3$ - $0.33BaTiO_3$ - $xKNbO_3$  (BF-BT-xKN) were fabricated using solid state reaction method. The results show that substituting KN instead of BF causes the sample to change from the normal ferroelectric state to the relaxor ferroelectric state. The recoverable energy storage density  $W_{rec}=0.9J/cm^3$  and the efficiency  $\eta=83\%$  were obtained for relaxor sample (x=0.1). Electric permittivity measurements show that the relaxor sample has high thermal stability. The results show that lead-free BF-BTxKN ferroelectrics can be used in next-generation pulsed power.

Keywords: BiFeO<sub>3</sub>, Energy storage, Lead-free ceramics, Relaxor ferroelectric, Thermal stability

PACS No. VV

 $W_{\rm rec} = \int_{Pr}^{P_{\rm max}} E \ dP$  به ترتیب مقدار قطبش در محاسبه کرد، که در اینجا  $P_{\rm max} \ P$  و  $P_{\rm rec}$  به ترتیب مقدار قطبش در میدان الکتریکی(E) ، قطبش اشباع و قطبش باقیمانده هستند. میدان الکتریکی(E) ، قطبش اشباع و قطبش باقیمانده هستند. بنابراین برای دستیابی به چگالی انرژی بالا، باید هر دوی  $-p_{\rm max}$ و میدان شکست دیالکتریک ( $E_{\rm B}$ ) مقدار بالایی داشته باشد. مقدار B را می توان با بهینه سازی فرایند ساخت، فناوری آلایش و غیره بهبود بخشید [۱, ۲]. P را می توان با تغییر ساختار فاز، بهبود رفتار واهلشی دیالکتریک یا ایجاد نقص در نمونه بهبود بخشید

#### مقدمه

خازنهای دیالکتریک بهدلیل چگالی توان بالا و آهنگ شارژ/دشارژ بسیار بالا در سالهای اخیر توجه زیادی را به خود جلب کردهاند. با این حال، چگالی ذخیرهسازی انرژی خازنهای دیالکتریک بهطور کلی بسیار کمتر از باتریها یا ابرخازنها است، که کاربرد آنها را در دستگاههای ذخیرهسازی انرژی محدود میکند. چگالی ذخیرهٔ انرژی قابل بازیافت (Wrec) خازنهای دی

[۳, ۴]. Pmax عمدتاً توسط گونهٔ عنصر محدود میشود [۵]. بنابراین برای دستابی به عملکرد عالی در ذخیرهسازی انرژی باید نمونه پایه دارای قطبش خودبهخودی (Ps) بالایی باشد.

فروالکتریکهای مبتنی بر BiFeO<sub>3</sub> (BF) در مقایسه با دیگر فروالکتریکها دارای قطبش ذاتی بالایی هستند. از این رو سرامیکهای مبتنی بر BF پتانسیلهای بسیار بیشتری برای دستیابی به ویژگیهای عالی ذخیرهسازی انرژی دارند. با این حال، این ترکیبات گاف انرژی پایینی دارند. همچنین بهدلیل تبخیر BI و کاهش <sup>+4</sup>Fe در حین کلوخهسازی رسانایی بالایی را نشان میدهند. بنابراین با بهبود BE در فروالکتریکهای مبتنی بر BF با استفاده از آلایش عناصر چندظرفیتی و کمک کنندهٔ پخت همچون CuO می توان به چگالی ذخیرهسازی انرژی بالایی دست یافت.

### ساخت و اندازهگیری

نمونههای محلول جامد -6.03BaTiO -6.03BiFeO -6.03BiFeO (0.67-x)BiFeO -6.03BiFeO -6.03Bi Sigo -6.03Bi Sigo -6.05 (x = 0, 0.1) xKNbO (x = 0, 0.1) xKNbO (x = 0, 0.1) xBigO (x = 0



شكل ۱: طرح پراش پرتو ايكس به همراه طرح تحليل ريتولد مربوط به نمونهٔ .0.67BiFeO3-0.33BaTiO3.

كلوخەسازى شدند.

ساختار فازی سرامیکها با استفاده از پراش پرتو ایکس و تحلیل آن با استفاده از نرم افزار FullProf مشخص شد. ریزساختار سرامیکها با استفاده از میکروسکوپ الکترونی روبشی انتشار میدانی (FESEM) مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفت. حلقهٔ پسماند فروالکتریک (P-E) نمونهها توسط چیدمان راهاندازی شده در دانشکدهٔ فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان اندازه گیری شد. پذیرفتاری الکتریکی (ɛr) نمونهها برحسب دما در بسامدهای مختلف با استفاده از دستگاه صنعتی اصفهان اندازه گیری شده

## نتايج و بحث

شکل ۱ طرح پراش پرتو ایکس به همراه طرح تحلیل ریتولد مربوط به نمونهٔ 0.67BiFeO<sub>3</sub>-0.33BaTiO<sub>3</sub> را نشان میدهد. نتیجهٔ تحلیل نشان میدهد نمونه بهصورت تکفاز در ساختار مکعبی با گروه فضایی Pm-3m متبلور شده است. نتایج تحلیل برای نمونهٔ 1.0=x هم همین گروه فضایی را نشان میدهد. پارامترهای شبکهٔ نمونهها، حاصل از تحلیل ریتولد در جدول ۱ نشان داده شده است. آلایش نمونه موجب افزایش ثابت شبکه و نشان داده شده است. آلایش نمونه موجب افزایش ثابت شبکه و انگستروم) نسبت به 1.00 (۱/۰۳ آنگستروم) بزرگتر است و شعاع یونی 1.95 (۱/۰۶۴ آنگستروم) در مقایسه با 1.95 (۱/۰۶۴ آنگستروم) میباشد.



جدول ۱: پارامترهای شبکه، حاصل از تحلیل ریتولد، مربوط به نمونههای (x = 0,0.1) (0.67-x)BiFeO3-0.33BaTiO3-xKNbO3

_	<i>x</i> = •	$x = \cdot / 1$
<b>a=b=c</b> (Å)	3/9910	۴/۰۰۲۲
$\alpha = \beta = \gamma$	٩.°	٩.°
<b>V</b> (Å <sup>3</sup> )	۶۳/۵۹۳۰	84/1.19
Bragg R-factor	•/۶۸۸۱	1/148.
<b>RF-factor</b>	•/۵۸۴۸	۱/۲۰۰۰
$\chi^2$	۱/۰۶	۱/۰۶

برای بررسی بیشتر ریزساختار نمونه ا تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی انتشار میدانی از سطح نمونه ا گرفته شد، که در شکل ۲ نشان داده شده است. همان طور که در شکل ۲ (الف) مربوط به نمونهٔ 0=*x* دیده می شود، توزیع اندازهٔ دانه ها غیریکنواخت است و بین دانه ها حفره وجود دارد. در صورتیکه با توجه به شکل ۲ (ب)، با اصلاح ریزساختار با کمک آلایش نمونه با دوم KNbO3 ریزساختاری متراکم و بدون هیچ حفره مشاهده می شود. همچنین اندازهٔ دانه ها ریزتر شده اند و توزیع یکنواختی را نشان می دهند. این نشان می دهد که KNbO3 رشد دانه ها را سرکوب می کند. علاوه بر این OuD به عنوان کمک کنندهٔ پخت موجب می بخشد [۶]. گزارش شده است که دمای پخت سرامیکهای نوع توجهی کاهش داد [۷].

شكل ۳ وابستگی دمایی پذیرفتاری الكتریكی نمونههای شكل ۳ وابستگی دمایی پذیرفتاری الكتریكی نمونههای مهتلف نشان می دهد. همان طور كه در شكل ۳(الف) مشاهده میشود، نمونه 0=x یک قله تیز در حوالی  $2^{\circ} - 40^{\circ} - 10^{\circ}$  نشان می شود، نمونه 0=x یک قله تیز در حوالی  $2^{\circ} - 40^{\circ} - 10^{\circ}$  نشان می دهد. با این حال نمونهٔ 1.0=x (شكل ۳(ب)) در اطراف  $T_{\rm m}$ پراكندگی فاز و گذار فاز پراكنده نشان می دهد. همان طور كه مشاهده می شود، با افزایش بسامد بیشینهٔ گذردهی (m) كاهش می یابد، m افزایش می یابد و گذار فاز پراكنده می شود. دلیل این اتفاق این است كه آلایش KN موجب تخریب نظم فروالكتریك دوربرد می شود. همان طور كه دیده می شود، در بسامدهای بالاتر پذیرفتاری الكتریكی در بازهٔ دمایی  $2^{\circ} - 7 - 7$ 





(ب) x=0.1

شکل ۲: تصاویر میکروسکوپ الکترونی رویشی انتشار میدانی نمونههای -0.67) x = 0,0.1)BiFeO3-0.33BaTiO3-xKNbO3 x).



شكل ۳: پذيرفتارى الكتريكى نسبى نمونەھاى -BiFeO3) شكل ۳: پذيرفتارى الكتريكى نسبى نمونەھاى -0.67-(0.67) (0.67-x) برحسب دما در بسامدھاى مختلف.

است. در نتیجه در این بازه دمایی ذخیرهٔ انرژی قابل بازیافت پایداری بسیار خوبی خواهد داشت، که این امر برای کاربردهای ڎٳؿڲٳڋ بيهييي

> صنعتی بسیار حائز اهمیت است. گزارش شده است که این رفتار پراکندگی به دلیل نانو نواحی قطبیده است که به خاطر از بین رفتن نظم بلند برد فروالکتریک در نمونه تشکیل می شود [۸]. به خوبی مشخص شده است که حضور کاتیونهای پیچیده با شعاع یونی متفاوت موجب پراکندگی گذار فاز در سرامیکهای مبتنی بر BFO می شود [۹].

> شكل ۴ حلقهٔ پسماند الكتريكى نمونههاى -0.67) شكل ۴ حلقهٔ پسماند الكتريكى نمونههاى -0.33BaTiO3-xKNbO3 الكتريكى در بسامد 3-0.33BaTiO3-xKNbO3 نشان مىدهد، كه در دماى محيط اندازه گيرى شده است. همان طور كه در شكل ۴(الف) ديده مى شود، نمونه 0=x رفتارى مشابه ساير فروالكتريكهاى معمولى نشان مى دهد، كه داراى پسماند و قطبش باقيماندهٔ بزرگى است. در شكل ۴(ب) مشاهده مى شود كه نمونهٔ آلايش داده شده با KN داراى قطبش باقيماندهٔ بسيار كمى است و رفتار نمونه واهلشى شده است. براى اين نمونه چگالى ذخيرهٔ انرژى قابل بازيافت مقدار m-83% و بازدهٔ m-83% بهدست آمد، كه مقدار قابل توجهى است.



سکل ۲: حلقه پسماند الکتریکی نمونههای ۲۰۵۰متری شده در دمای محیط. (x = 0,0.1) xKNbO3) در بسامد xFlz) در بسامد

نتيجه گيري

سرامیکهای بدون سرب -۵.33BaTiO، سرامیکهای بدون سرب -۵.33BaTiO، KNbO، xKNbO، xKNbO، x با استفاده از روش واکنش حالت جامد ساخته شدند. جانشانی xKNbO، به جای BF به طور قابل ملاحظهای موجب کاهش اندازهٔ دانه و افزایش میدان الکتریکی شکست می شود. همچنین موجب واهلشی شدن پذیرفتاری الکتریکی و حلقهٔ پسماند می شود. به طور مشخص تر، مشاهده شد که برای نمونهٔ واهلشی در بسامدهای بالا پذیرفتاری الکتریکی در بازهٔ دمایی  $2^{\circ}$ ۰۰۲ تا بسامدهای بالا پذیرفتاری الکتریکی و حلقهٔ پسماند می شود. پوگالی ذخیرهٔ انرژی قابل بازیافت مقدار  $7^{\circ}$ ۰۰۶ تو بازدهٔ چگالی ذخیرهٔ انرژی قابل بازیافت مقدار موجب موالاکتریکهای و بازدهٔ محلول جامد FE واهلشی می توانند به عنوان سرامیکهای بدون مرب برای خازنهای توان پالسی نسل بعدی در نظر گرفته شوند.

## مراجع

- [1] Y. H. Huang, Y. J. Wu, W. J. Qiu, J. Li, and X. M. Chen, "Enhanced energy storage density of Ba0. 4Sr0. 6TiO3–MgO composite prepared by spark plasma sintering," *Journal of the European Ceramic Society*, vol. 35, No. 5, pp. 1469-1476, 2015.
- [2] A. Chauhan, S. Patel, R. Vaish, and C. R. Bowen, "Antiferroelectric ceramics for high energy density capacitors," *Materials*, vol. 8, No. 12, pp. 8009-8031, 2015.
- [3] H. Qi and R. Zuo, "Linear-like lead-free relaxor antiferroelectric (Bi 0.5 Na 0.5) TiO 3–NaNbO 3 with giant energy-storage density/efficiency and super stability against temperature and frequency," *Journal of Materials Chemistry A*, vol. 7, No. 8, pp. 3971-3978, 2019.
- [4] L. Fan *et al.*, "Structure, piezoelectric, and ferroelectric properties of BaZrO "substituted Bi (Mg1/2Ti1/2) O3-PbTiO3 perovskite," *Journal of Applied Physics*, vol. 111, No. 10, p. 104118, 2012.
- [5] D. Lebeugle, D. Colson, A. Forget, and M. Viret, "Very large spontaneous electric polarization in bi fe o 3 single crystals at room temperature and its evolution under cycling fields," *Applied Physics Letters*, vol. 91, No. 2, p. 022907, 2007.
- [6] W. Gao, J. Lv, and X. Lou, "Large electric-field-induced strain and enhanced piezoelectric constant in CuO-modified BiFeO3-BaTiO3 ceramics," *Journal of the American Ceramic Society*, vol. 101, No. 8, pp. 3383-3392, 2018.
- [7] Y. Zhao, Y. Zhao, R. Huang, R. Liu, and H. Zhou, "Microstructure and piezoelectric properties of CuO-doped 0.95 (K0. 5Na0. 5) NbO3–0.05 Li (Nb0. 5Sb0. 5) O3 lead-free ceramics," *Journal of the European Ceramic Society*, vol. 31, No. 11, pp. 1939-1944, 2011.
- [8] X. Shan, C. Zhou, Z. Cen, H. Yang, Q. Zhou, and W. Li, "Bi (Zn1/2Ti1/2) O3 modified BiFeO3–BaTiO3 lead-free piezoelectric ceramics with high temperature stability," *Ceramics International*, vol. 39, No. 6, pp. 6707-6712, 2013.
- [9] X. Zhang et al., "Transparency of K0. 5N0. 5NbO3–Sr (Mg1/3Nb2/3) O3 lead-free ceramics modulated by relaxor behavior and grain size," *Ceramics International*, vol. 42, No. 16, pp. 17963-17971, 2016.





### بررسی خواص ساختاری و ساختار نواری NiMnSb به کمک نظریهٔ تابعی چگالی صالحی ، حمداله ؛ فرد علیدادی، زینب

کروه فیزیک، دانشگاه شهید چمران، اهواز ۲ گروه فیزیک، دانشگاه شهید جمران، اهواز

چکیدہ

در این پژوهش، ویژگیهای ساختاری و ساختار نواری NiMnSb در دو فاز مکعبی بتا و گاما در حالت انبوهه بررسی شده است. محاسبات با استفاده از روش امواج تخت بهبود یافتهٔ خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی و با استفاده از بستهٔ محاسباتی Wien2k انجام شده است. ویژگیهای ساختاری نظیر ثابت شبکه و مدول حجمی محاسبه و با مقدار تجربی مقایسه و نتایج حاصل از محاسبات مدول حجمی، حاکی از سختی زیاد NiMnSb در فاز بتا میباشد. محاسبات ساختار نواری نیز نشان میدهد که ترکیب در هر دو فاز فلز بوده و گاف نواری ندارد. **واژه های کلیدی**: نظریهٔ تابعی چگالی، پارامترهای ساختاری، GGA-PBE، مدول حجمی.

# Investigating the structural properties and band structure of NiMnSb using density functional theory

#### Salehi, Hamdollah<sup>1</sup>, Fard Alidadi, Zeinab<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Shahid Chamran University, Ahvaz. <sup>2</sup> Department of Physics, Shahid Chamran University, Ahvaz.

#### Abstract

In this research, structural properties of NiMnSb in two Beta and Gamma cubic phase of a bulk have been studied. Calculations performed using the full potential linearized augmented plane waves method within the framework of density functional theory and using computing package Wien2k. Structural features, including lattice parameter and bulk modulus were calculated and compared with the experimental values and the results Calculating bulk modulus, indicates the high hardness of NiMnSb in Beta phase. The band structure calculations also show that the composition is metal in both phases and has no band gap.

Keywords: Density Functional Theory, Structural parameters, GGA-PBE, Bulk modulus.

میتوان بهمطالعهٔ تجربی [۵] و بررسی ویژگیهای ساختار، الکترونی و اپنیکی ترکیب بهکمک نظریه تابعی چگالی اشاره کرد [۲۲-۷]. در این پژوهش قد داریم بهبررسی ویژگیهای ساختاری فاز بتا و گاما در حالت مکعبی بپردازیم. توصیف روش

در این مقاله ویژگیهای ساختاری ترکیب NiMnSb در حالت مکعبی در دو فاز ساختاری مکعبی آلفا و بتا مورد مطالعه قرار گرفته است. محاسبات برپایهٔ نظریهٔ تابعی چگالی و روش امواج تخت بهبود یافتهٔ خطی با پتانسیل کامل بهکمک کد محاسباتی Wien2k انجام شده است [۱۳]. برای محاسبهٔ انرژی تبادلی-همبستگی از تقریبهای GGA-PBE، GGA-PBE و LSDA استفاده شده است. انرژی جداسازی حالت مغزه و ظرفیت مقدار ۲Ry- انتخاب و با دقت Ry حالت مغزه و ظرفیت مقدار انجام گرفت. مقدار بهینهٔ Rkmax در این مطالعه در فاز بتا و گاما مقدار ۵/۸ و مقدار Gmax (-(a.u<sup>-1</sup>)) انتخاب شد. تعداد نقاط در ناحیهٔ بین جایگاهی

### مقدمه

یکی از مباحث علمی جدید که امروزه مطالعات فر او انی را بهخود اختصاص داده است؛ بحث اسپينترونيک ميباشد. اسپینترونیک یک شاخه از الکترونیک بوده که بهمطالعهٔ اثر اسپین الکترون در زمینهٔ فیزیک ماده چگال میپردازد. توانایی ايجاد سرعت بالا در بردازش اطلاعات، كاهش توان مصرفي و ساخت حافظهٔ غیر فرار از جمله کارآییهای این فناوری میباشد. در این میان، ترکیبات هویسلر موادی هستند که اهمیت ویژهای در کاربردهای اسپینترونیکی دارند [۱]. تركيبات هويسلر از جمله مواد مغناطيسي هستند كه بهدو دسته نيمھويسلر دستەبندى مىشوند هويسلر كامل يا تركيب [۲]. ترکیب NiMnSb یک ترکیب نیمهویسلر بوده که در سه فاز NiMn با ساختار B2، فاز NiMnSb هويسلر كامل با نیمهویسلر با ساختار C1b ساختار L21 و فاز NiMnSb تقسیمبندی میشوند [۳] که این ساختار نیمهویسلر NiMnSb خود بهتنهایی شامل سه فاز آلفا، بتا و گاما میباشد [۴]. از ميان مجموعه مطالعات انجام شده بر روى تركيب NiMnSb،



بتا و گاما ۹۰۰ و ۷۰۰ به عنوان مقدار بهینه گزارش شد. برای اتم نیکل اوربیتالهای 3d<sup>8</sup>، 4s<sup>2</sup>، برای اتم منگنز اوربیتالهای 3d<sup>5</sup>، 4s<sup>2</sup> و برای اتم آنتیموان اوربیتالهای 5s<sup>2</sup>، 5p<sup>3</sup> به عنوان الکترونهای لایهٔ ظرفیت در نظر گرفته شد. در شکل ۱ و ۲ سلول قراردادی ترکیب NiMnSb در دو فاز بتا و گاما در حالت مکعبی آورده شده است.



شکل ۱ : سلول قرار دادی ترکیب NiMnSb در فاز بتا.



شکل ۲ : سلول قراردادی ترکیب NiMnSb در فاز گاما.

### بحث و نتايج

برای محاسبهٔ ویژگیهای ساختاری ترکیب، انرژی یاخته بسیط را حول حجمهای مختلف اطراف حجم تعادلی محاسبه کرده؛ سپس توسط معادلهٔ مورناگون [۱۴] و طبق رابطهٔ زیر نمودار انرژی برحسب حجم ترسیم میشود:

$$E(V) = E_0 + \frac{BV_0}{B'} \left[ \frac{V}{V_0} + \frac{\left(\frac{V}{V_0}\right)^{1-B'} - B'}{B' - 1} \right]$$
(')

در این معادله  $E_0$  انرژی حالت پایه، B مدول حجمی، B' مشتق مدول حجمی و  $V_0$  حجم تعادلی می اشد. در این محاسبات، و ابستگی انرژی به حجم محاسبه و سپس توسط معادلهٔ (۱) ثابت شبکه محاسبه می شود. همان گونه که مشاهده می شود منحنی انرژی کل بر حسب حجم (شکل ۳) دار ای کمینه بوده و به معنای مثبت بودن مدول حجمی و پایداری ساختار می اشد. سپس، با

به کار بردن معادلهٔ مورناگون پارامترهای ساختاری مقایسه و گزارش شدهاند. با توجه به مقادیر محاسبه شده در جدول ۱ تقریب GGA-PBE در مقایسه با دیگر تقاریب، از نظر انرژی پایدارترین ساختار را پیش بینی میکند و سازگاری خوبی با محاسبهٔ انجام شده دارد.

.1411011150 -	جدون . بررسی ویر دی های ساختاری تر دیب			
ساختار	تقريب	$a(A^0)$	E(Ry)	
ساختار مکعبی بتا (F 4 3-m)	GGA-PBE	۵٫۹۲	-18879,78	
	GGA-pbsol	۵٫۸۳	-12210/24	
	LSDA	٥ <sub>/</sub> ٧۶	-1 \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \	
ساختار مكعبى	GGA-PBE	91.9	-12279/21	
(F <del>4</del> 3-m)	کما <del>4</del> 3-m) GGA-pbsol		-12210/22	
	LSDA	0,14	-185.9/18	
	کار تجربی [۱۵]	۵/۹۲	-	

جدول۱ : بررسی ویژگیهای ساختاری ترکیب NiMnSb







مدول حجمی تمایل جسم بهتغییر شکل در تمامی جهتها را نشان داده و توسط رابطهٔ زیر تعریف می شود [۱۶]: (۲)

$$B = -V \frac{dP}{dV}$$

تراکمپذیری عکس مدول حجمی میباشد، هرچه مدول حجمی بلور بیشتر، بلور سخت تر و تراکمپذیری آن کمتر میباشد. نتایج حاصل از مدول حجمی و تراکمپذیری در جدول ۲ گزارش شده است. مقدار بزرگ مدول حجمی فاز بتا در مقایسه با فاز گاما بیانگر تراکمپذیری کم و سختی زیاد ترکیب در این فاز میباشد. همچنین، از زیاد بودن مقدار مدول حجمی در فاز بتا در مقایسه با دیگر فاز میتوان نتیجه گرفت که ترکیب MiMnSb شکل در بلور آن انرژی زیادی لازم است.

جدول۲ : بررسی مدول حجمی و تراکمپذیری ترکیب NiMnSb.					
ساختار	تقريب	$B_0(GPA)$	$K \times 10^{-3} (GPA)^{-1}$		
ساختار مکعبی بتا	GGA-PBE	٩٥/٥٦	۱۰/۴۶		
F 4 3-) (m	GGA-pbsol	177/	٨,١٢		
	LSDA	14.,.7	٧/١۴		
ساختار	GGA-PBE	۹ <i>۵</i> /۲۹	۱۰/۴۹		
مکعبی کاما F 4 3-) (m	GGA-pbsol	۹۹ <sub>/</sub> ۰۷	۱۰/۰۹		
(	LSDA	٨.,.۶	17/49		

در این پژوهش، علاوه بر خواص ساختاری، ساختار نواری ترکیب در هر دو فاز مورد مطالعه قرار گرفته است. به کمک ساختار نواری میتوان ماهیت بلور از لحاظ فلز، نیمرسانا و عایق بودن، اندازهٔ گاف و نوع گاف را مورد بررسی قرار داد. ساختار نواری ترکیب با استفاده از تقریب GGA-PBE در شکل ۴ و ۵ آورده شده است. در هر دو نمودار تراز فرمی بر روی انرژی صفر قرار دارد. منحنی ساختار نواری نشان می-دهد که حالت انبوههٔ ترکیب در فاز بنا و گاما فلز بوده و در هر دو حالت اسپین بالا و پایین گافی مشاهده نمی شود. همچنین، عمدهٔ مشارکت اربیتالها در نوار ظرفیت میباشد.

شکل<sup>4</sup>: ساختار نواری ترکیب در فاز بتا (الف) اسپین بالا و (ب) اسپین پایین. شکل۵: ساختار نواری ترکیب در فاز گاما (الف) اسپین بالا و (ب) اسپین

سکان استخار تواری ترکیب در قار کان (ایک) اسپین بالا و (ب) اسپین پایین.

نتيجەگيري

۳۷۸



از دیگر پارامترهای ساختاری میتوان بهمدول حجمی و تراکمپذیری اشاره کرد. مدول حجمی در واقع یک معیار برای تغییر شکل معین در سامانه و سختی بلور میباشد. بهعبارتی، هنگامی که بلور در معرض یک نیروی ثابت قرار بگیرد؛





در این پژوهش خواص ساختاری و ساختار نواری ترکیب NiMnSb در دو فاز بتا و گاما توسط نظریهٔ تابعی چگالی و کد محاسباتی Wien2k انجام گرفت. نتایج محاسبه شده با تقریب GGA-PBE در توافق بیشتری با دیگر مطالعات می-باشد. نتایج مدول حجمی محاسبه شده در هر دو فاز نشان می-دهد که ترکیب در فاز بتا سختی بیشتری در مقایسه با فاز گاما داشته و به سختی تغییر شکل میدهد. علاوه بر این، نمودار ساختار نواری نشان میدهد که ترکیب در فاز بتا و گاما فلز بوده و گاف نواری ندارد. از آن جا که هیچ پژوهش تجربی ونظری برای سنجش گاف نواری در این دو فازوجود ندارد، معیاری برای مقایسه نداریم.

### مرجعها

[1] I. Zutic; J. Fabian and S. D. Sarma; "Spintronics: Fundamentals and applications"; *Reviews of modern physics* **76**, (2004) 323.

[2] T. Graf; C. Felser and S. S. Parkin; "Simple rules for the understanding of Heusler compounds"; *Progress in solid state chemistry* 39, (2011) 1-50.

[3] T. Miyamoto; M. Nagasako and R. Kainuma; "Phase equilibria in the Ni-Mn-Sb alloy system"; *Alloys and Compounds* **772**, (2019) 64-71.

[4] V. DINH; K. SATO AND H. KATAYAMA; "New High-Tc Halg-Heusler Ferromagnets NiMnZ (Z=Si, P, Ge, As)"; *Physical Society of Japan* **71**, No. 1 (2008) 014705-6.

[5] A. J. Bradley and J. Rodgers; "The crystal structure of the Heusler alloys"; *Mathematical and Physical & ENGIEERING SCIENCES* **144**, (1934) 340-359.

[6] G. Bona; F. Meier; M. Taborelli; E. Bucher and P. Schmidt; "Spin polarized photoemission from NiMnSb"; *Solid state communications* **56**, (1985) 391-394.

[7] M.Sugiyanto; A. Majidi and D. Nanto; "Modeling of half-Heusler compound NiMnSb within tight-binding approximation"; AIP Conference Proceedings, (2017) 030020-5.

[8] R. De Groot; F. Mueller; P. Van Engen and K. Buschow; "New class of materials: half-metalic ferromagnets"; *Physical Review Latters* **50**, No. 25 (1983) 2024-2027.

[9] R. De Groot; A. Van der Kraan and K. Buschow; "FeMnSb: a halfmetallic ferrimagnet"; *magnetism and magnetic materials* **61**, (1986) 330-336.

[10] A. Debernardi; M. Peressi and A. Baldereschi; "Structural and electronic properties of NiMnSb Heusler compound and its interface with GaAs"; *Materials Science and Engineering* **23**, (2003) 743-746.

[11] Y. Ma; H. Hao; X. Liu; H. Luo; F. Meng and H. Liu; "Influence of Fe-doping on magnetic structure and martensitic transformation in NiMnIn and NiMnSb alloys"; *Intermetalics* **93**, (2018) 263-268.

[12] V. Uvarov; N. Uvarov and M. Melnik; "Electronic Structure and Magnetic Properties of Heusler Alloys MMnSb (M= Ni, Pd, Pt)"

Ukrayins kij Fyizichnij Zhurnal (Kyiv) 66, (2021) 450-455.

[13] P. Blaha; K. Schwarz; G. Madsen; D. Kvasnicka and J. Luitz; "Wien2k"; An augmented plane wave+ local orbitals program for calculating crystal properties (2011).

[14] Su. H. Wei; H. Krakauer and M. Weinert; "Lieanrized augmentedplane-wave calculation of the electronic structure and total energy of tungsten"; *Physical Review* **B32**, (1985) 7792-7797.

[15] P.Webster and R. M. Mankikar; "Ghemical order and magnetic properties of the Ni 2-xMnSb system"; Magnetism Magenetic Materials 42, (1984) 300-308.

[16] A. Cairns and A. Goodwin; "Negative linear compressibility"; *Physical. Chemistry Chemical Physics* **17**, (2015) 20449-20465.





مقدمه

## مطالعه تطبیقی بستهبندی پلیمر نیمه انعطاف پذیر به داخل نانو کره با استفاده از شبیهسازی دینامیک مولکولی

محرمینژاد، فاطمه؛ قنبری کاشان، سمانه؛ نیکوفرد، نرگس پژوهشکده علوم و فناوری نانو، دانشگاه کاشان، کاشان

## چکیدہ

زنجیره های پلیمری در فرآیندهای مختلف زیستی در محدوده های نانومقیاس بسته بندی می شوند. مثلا ژنوم یک ویروس در کپسول آن بسته بندی شده است. دی انای یک زنجیره زیستی بسیار شناخته شده است که سختی خمشی بالایی دارد. در حالی که RNA سختی خمشی بسیار کمی دارد. در این مطالعه با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی به بررسی فرآیند بسته بندی یک زنجیره نیمه انعطاف پذیر در یک نانو کره از طریق یک نانو حفره می پردازیم که نشان می دهد نحوه بسته بندی زنجیره و ساختار نهایی بستگی زیادی به سختی خمشی زنجیره و همچین اندازه هندسه محدودکننده دارد. و اژ ههای کلیدی: پلیمر نیمه انعطاف پذیر، پلیمر های محصور شده، نانو کره، شبه سازی.

# Comparative study of semi-flexible polymer packing into nanospheres using molecular dynamics simulation

### Moharaminezhad, Fatemeh; Ghanbari-Kashan, Samaneh; Nikoofard, Narges

Institute of Nanoscience and Nanotechnology, University of Kashan, Kashan

Polymer chains are packed in nanoscale ranges in various biological processes. For example, the genome of a virus is packed in its capsule. DNA is a well-known biological chain that has high bending stiffness. While RNA has a very low bending stiffness. In this study, using molecular dynamics simulation, we investigate the packing process of a semi-flexible chain in a nanosphere through a nanohole, which shows that the way the chain is packed and the final structure depends a lot on the bending stiffness of the chain and the size of the limiting geometry.

Keywords: Semi – flexible polymer, Polymer confinement, Nanosphere, Simulation.

PACS No. 87, 89

مبحث کاربرد محدودسازی پلیمر در محدودیت های کروی، فرآیندهایی مثل رسانش هدفمند دارو، تزریق DNA ویروس به سلول میزبان و بحث انتقال ژن است. به علاوه، هسته سلول را میتوان به عنوان یک محدودیت (سه بعدی) در نظرگرفت که DNA را محصور می کند. اگر اندازه محدودیت کروی به گونهای باشد که زنجیره DNA به شدت در آن مقیاس طول خم شود، هزینه انرژی خمشی زیادی خواهد داشت. یک مولکول خطی DNA در داخل یک کره پیکربندی هایی را به خود می گیرد که موجب کاهش انرژی خمشی و در عین حال افزایش آنتروپی آن شود. [۱].

زنجیرههای پلیمری در فرآیندهای مختلف زیستی در محدوده های نانومقیاس بسته بندی می شوند چون این زنجیره ها در طبیعت و در سامانه های زیستی به صورت آزاد وجود ندارند. به عنوان مثال، DNA یکی از مهمترین پلیمرهای زیستی است که در درون هسته سلول محدود شده است. برای بررسی دینامیک این زنجیرهی محدود می توان، یک رشته پلیمر نیمه انعطاف پذیر محصور شده در یک نانو کره را شبیه سازی و اثرات محدودیت را روی بسنه بندی آن بررسی کرد. از جمله موارد حائز اهمیت در



در مورد ساختارهای تعادلی و منظم یک رشته پلیمری نیمهانعطاف پذیر در محدودیتهای سه بعدی نیز مطالعات زیادی صورت گرفته است [۲و۳]. شبیهسازیهای دیگری نشان داده است که توپولوژی زنجیره بر سرعت خروج پلیمر تاثیر زیادی دارد. در شرایطی که ساختار پلیمر بهمریخته و غیرتعادلی باشد، سرعت خروج پلیمر کمتر است [۴].

اخیرا خروج پلیمر نیمه انعطاف پذیر از کره بصورت نظری بررسی شده است [۵]. اما نیاز هست که درستی این نظریه با شبیهسازی های کاملی بررسی شود. تاکنون کار شبیهسازی که درستی تئوری را بررسی کند انجام نشده است. البته در این شبیه سازی دقت زیادی لازم است تا تنها تاثیر عوامل اصلی در بسنهبندی رشته پلیمری بررسی شوند.

در کارهای گذشته نشان داده شده است که هر چه بسته بندی آهسته تر انجام شود، گره های سخت تر و یا پیچیده تری تشکیل می شوند که سرعت خروج را کم می کنند. همچنین، بسته بندی سریع منجر به ایجاد ساختارهای عدم تعادلی می شود. همچنین، سرعت های بسته بندی میانی به ترین ساختارهای تعادلی را می دهند [7].

در این مطالعه، با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی عوامل اصلی جهت بستهبندی رشته پلیمر نیمه انعطاف پذیر به درون کره از طریق یک نانو حفره بررسی می شود. ساختار نهایی پس از بستهبندی و سرعت بستهبندی از پارامترهای مورد علاقه هستند.

### روش شبيهسازى

شبیه سازی ها با بسته اسپرسو انجام می شوند که بدون واحد است. یعنی کلیه واحدها با واحدهای اولیه بی بعد می شوند در واقع اسپرسو یک بسته ی شبیه ساز برای شبیه سازی دینامیک مولکولی مربوط به سیستم های دانه فنر درشت دانه است. از این نرم افزار برای بررسی مواد نرم از جمله پلیمرها، کلوئیدها، بلورهای مایع و DNAها استفاده می شود. در شبیه سازی حاضر پلیمر متشکل از N پلیمر با طول واحد فرض می شود که با پیوند FENE به یک دیگر متصل شده اند. بر همکنش لنارد – جونز برای اینکه مونو مرها در یکدیگر فرو نروند استفاده می شود. بر همکنش کسینو سی برای

اعمال سختی خمشی به پلیمر استفاده می شود، که ثابت خمشی تقریباً برابر با طول ایستایی پلیمر P گرفته می شود. قید کروی با قطر D که حاوی نانو حفره ای با قطر b هست درون شبیه سازی قرار داده می شود. در ابتدای شبیه سازی پلیمر روی یک خط بیرون کره پشت حفره چیده می شود که از حالت تعادل دور است و باید به تعادل برسد. شبیه سازی در دو مرحله انجام می شود: ۱- تعادل پلیمر در پشت نانو حفره و ۲- بسته بندی پلیمر. زمان ایس مرحله بنابر مدل رووز انتخاب می شود که متناسب با طول پلیمر به توان و پس از پایان تعادل، با نیروی مشخص ۲۱= هم و تشکیل شده کشیده می شود. در حین ورود پلیمر، ساختارهای تشکیل شده می شوند.

## نتايج شبيهسازى

در مطالعه حاضر بستهبندی یک رشته پلیمر نیمهانعطاف پذیر به طول ۹۶ به درون کرهای با قطرهای برابر ۷ ، ۱۰ و ۱۵ که با یک نیروی مشخص ۲۱=f<sub>pack</sub> از طریق یک نانوحفره به قطر ۳ کشیده میشود، انجام شد. برای طول ایستاییهای مختلف، ساختارهای تشکیل شده پلیمر داخل کره بصورت شکل ۲ و۳ نشان داده شده است.



شکل ۱ : ساختار تشکیل شده پلیمر با طول ۹۶ به درون کره به قطر ۷. الف) ۶=۹، ب) p=۱۰, ج) p=۹، د) ۹۰ =۹، و) p=۱۰، م) ۴۰ =۹.





شکل ۲ : ساختار تشکیل شده پلیمر با طول ۹۶ به درون کره به قطر ۱۰. الف) p=۲، ب) p=۱۵، p=۱۵، د) p=۲۰، د) p=۲۰، و) D=۱۵، p=۱۵.

همانطور که در شکل ۱ و ۲ مشاهده می شود با افزایش قطر کره نوع بستهبندی پلیمر داخل کره دچار فشردگی کمتری می شود و با افزایش طول ایستایی پیکربندی منظم تری که به صورت قرقره است به خود می گیرند.

شکل ۳ تعداد مونومرهایی که با گذشت زمان وارد کره با قطـر ۷ میشوند را نشان میدهد.



شکل۳ : تعدا مونومرهای وارد شده به درون کره به قطر ۷ نسبت به زمان.

همانطور که در شکل ۳ مشاهده می شود در یک بازه زمانی معین تعداد مونومرهایی که وارد کره می شوند برای طول ایستایی بیشتر، کمتر است و این بیانگر این موضوع است که با افزایش طول ایستایی سرعت ورود مونومرها به داخل کره کاهش می یابد و از گره خوردن رشته پلیمری جلوگیری می کند و ساختار منظمتری که به صورت قرقره است به خود می گیرد.

شکل ۴ تعداد مونومرهایی که با گذشت زمان وارد کره با قطر ۱۰ و ۱۵ میشوند را نشان میدهد.



شکل۴ : تعدا مونومرهای وارد شده به درون کره به قطر ۱۰ و۱۵ نسبت به زمان.

در شکل ۴ در یک بازه زمانی معین تعداد مونومرهایی که وارد کره می شوند همانند شکل ۳ برای طول ایستایی بیشتر، کمتر است یعنی با افزایش طول ایستایی سرعت ورود مونومرها به داخل کره کاهش می یابد. اما کل مونومرها در شکل ۴ نسبت به شکل ۳ در زمان کمتری وارد کره می شوند یعنی سرعت ورود آنها به داخل کره بیشتر است و به همین دلیل تغییر قطر کره در نحوه بسته بندی پلیمر موثر است. همچنین در شکل ۴ نسبت به شکل ۳ با افزایش قطر کره به ۱۵ و برای طول ایستایی یکسان ۱۵ سرعت ورود پلیمر از ساختار منظم قرقرهای خود دور شود که ایس مورد در شرایط یکسان طول ایستایی، نحوه بسته بندی پلیمر را با تغییر قطر کره نشان می دهد.

## نتيجه گيري

در این مقاله، نحوه بستهبندی پلیمرها با طولهای ایستایی مختلف داخل نانوکره با اندازههای مختلف به صورت شبیهسازی دینامیک مولکولی بررسی شد. نیروی ثابت ۲۱=f<sub>pack</sub> برای کشیدن پلیمر به داخل نانوکره از طریق یک نانوحفره استفاده شد. می توان گفت که این نیرو از جمله نیروهای متوسط در مرجع ۳ است. بنابراین انتظار داریم که ساختار بستهبندی شده تعادلی باشد.



پلیمر ساختارهای متنوعی داخل کره بسته به طول ایستایی و قطر کره از خود نشان میدهد. نتایج نشان میدهد که هر چه مقدار طول ایستایی بیشتر و یا قطر کره کاهش یابد، بستهبندی پلیمر در مدت زمان بیشتر و یا با سرعت کمتر صورت میگیرد و باعث میشود ساختار داخل کره پیکربندی منظمتری که به صورت قرقره است به خود بگیرد.

مرجعها

- Liang, Q., Jiang, Y., & Chen, J. Z. (2019). Orientationally ordered states of a wormlike chain in spherical confinement. Physical Review E, 100(3), 032502.
- [2] Matthews, R., Louis, A. A., & Yeomans, J. M. (2009). Knotcontrolled ejection of a polymer from a virus capsid. Physical Review Letters, 102(8), 088101.
- [3] Park, C. B., & Sung, B. J. (2021). Effects of Packaging History on the Ejection of a Polymer Chain from a Small Confinement. Macromolecules, 54(15), 7174-7182.
- [4] Marenduzzo, D., Micheletti, C., Orlandini, E., & Sumners, D. W. (2013). Topological friction strongly affects viral DNA ejection. Proceedings of the National Academy of Sciences, 110(50), 20081-20086.

[۵] فرزانه معظمی، خروج پلیمر نیمهانعطافپذیر از نانوساختار کروی، دانشگاه

کاشان، مهر ۱۴۰۰





## اثر هال غیرعادی در آلیاژ پادفرومغناطیس Mn<sub>3</sub>Sn

خوش پيام، جواد ؛ احمدوند، حسين

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

چکیدہ

اخیراً پادفرومغناطیس Mn3Sn به دلیل خواص منحصر به فرد خود مانند اثر هال غیرعادی بزرگ، اثر کر و اثر نرنست غیرعادی بزرگ توجه زیادی را به خود جلب کرده است. بدست آوردن اثر هال غیرعادی بزرگ در لایه نازک Mn3Sn به اندازه کافی برای کاربرد آن در علم اسپیترونیک پادفرومغناطیس ضروری است. در این مقاله، روش ساخت تودهای و لایه نازک Mn3Sn گزارش شده است. ما توانستیم اثر هال غیرعادی را در لایه نازک Mn3Sn که بر روی زیر لایه Al2O3 با ضخامت ۱۲۰ نانومتر لایه نشانی شده است را مشاهده کنیم. یافتههای ما مسیر را برای توسعه اسپیترونیک پادفرومغناطیس قروری است. در این واژه های کلیدی: اثر هال غیرعادی، یادفرومغناطیس، انحنای بری، اسپیترونیک پادفرومغناطیس هموار میکند.

### Anomalous Hall effect in Mn<sub>3</sub>Sn antiferromagnetic alloy

Khoshpayam, Javad; Ahmadvand, Hossein

Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan

#### Abstract

The antiferromagnet  $Mn_3Sn$  has been recently attracting considerable attention due to its unique properties like a large anomalous Hall effect, kerr effect and large anomalous Nernst effect. achieve AHE in thin enough  $Mn_3Sn$ film is urgently desired for its application in antiferromagnetic spintronics. In this article, the  $Mn_3Sn$  bulk and thin film make method is reported. We were able to observe the anomalous Hall effect in the  $Mn_3Sn$  thin film deposited on  $Al_2O_3$  substrate with a thickness of 120 nm. Our findings would pave the path for developing antiferromagnetic spintronics.

Keywords: Anomalous Hall effect, Antiferromagnet, Berry curvature, Spintronics

PACS No. 75

قادر به ایجاد اثرات ترابردی مغناطیسی بزرگ هستند. بنابراین به عنوان یک ماده اسپینترونیک برای دستگاههای حافظه با چگالی بالا و فوق سریع توجه زیادی را به خود جلب کردهاند[۴–۱]. در سالهای اخیر بسیاری از مطالعات نظری نشان دادهاند که اثر هال غیرعادی بزرگ نیز میتواند در مواد پادفرومغناطیس بر پایه منگنز (Mn<sub>3</sub>Z(Z=Sn, Ge, Ga,Ir مشاهده شود. منشاء اصلی اثر هال غیرعادی در پادفرومغناطیسها مغناطش نیست بلکه به دلیل وجود انحنای بری است.

مقدمه

نسل دستگاههای اسپیترونیک بر پایه پادفرومغناطیسها، بسیار سریع هستند و توان مصرفی بسیار پایینی دارند و بهطور ایدهآل بدون اختلال خواهندبود. بنابراین مواد پادفرومغناطیس با خواص توپولوژیکی خود برای دستگاههای اسپینترونیک آینده بسیار مطلوب هستند و انتظار میرود که مواد پادفرومغناطیس از مواد فرومغناطیس پیشی بگیرند. مواد پادفرومغناطیس در برابر اختلال ناشی از میدان مغناطیسی قوی هستند و خود هیچ میدان مغناطیسی تولید نمیکنند، همچنین این مواد دینامیک اسپینی فوق سریع را نمایش میدهند و



انحنای بری<sup>۱</sup> نقش مشابهای از میدان مغناطیسی دارد که منجر به ایجاد اثر هال غیرعادی می شود[۱].

یادفرومغناطیس  $Mn_3Sn$  دارای ساختار هگزاگونال از نوع Mn\_3Sn با گروه فضایی  $P6_3/mmc$  است و داراری پارامترهای شبکه Ni\_3Sn با گروه فضایی c = 4/3 است [۵]. هر صفحه a-b یک شبکه کاگومه<sup>۲</sup> را نشان می دهد که از ممانهای Mn به وجود آمده است. ناکامی هندسی ممانهای منگنز به صورت اسپین مثلثی معکوس به وجود می آید که گشتاور فرومغناطیس خالص بسیار کوچک حدود و. و. و. و. می اشد[۵].

## روش تجربی

آلیاژ بس بلوری تودهای Mn<sub>3</sub>Sn از مواد اولیه منگنز و قلع با درصد خلوص ۹۹/۹۸٪ به روش ذوب قوسی تحت اتمسفر آرگون ساخته شد. برای جبران اتلاف منگنز هنگام ذوب از منگنز بیشتر استفاده شد. نمونهها در لوله کوارتز خلاء شده به مدت ۶ روز در دمای ۲۰۰۵ بازپخت شدند و به آرامی تا دمای اتاق خنک شدند. روش ساخت لایه نازک

لایههای نازک Mn<sub>3</sub>Sn دارای ضخامت تقریبی ۱۲۰ نانومتر (شکل ۴) با روش لایه نشانی لیزر پالسی از هدف Mn<sub>3</sub>Sn در محیط خلاء در دمای C°۰۰ بر روی زیرلایههای Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> لایه نشانی شدند. فشار خلاء محفظه برابر torr <sup>۶-</sup>۱۰×۱/۲ و فشار هنگام لایه نشانی فشار خلاء محفظه برابر torr <sup>۶-</sup>۱۰×۲/۱ و فشار هنگام لایه نشانی torr <sup>۵-</sup>۱۰×۲/۲ بود. پس از لایه نشانی نمونهها به مدت ۲۰ دقیقه در خلاء با فشار torr <sup>۵-</sup>۱۰×۲/۲ در دمای C°۰۰ بازپخت شدند. فاصله زیرلایهها تا هدف ۵ سانتیمتر بود و از لیزر Nd: YAG با طول موج ۱۰۶۴ نانومتر، شدت پالس ۲۰۰ میلی ژول، نرخ تکرار پالس ۵ هرتز و طول پالس ۱۰ نانو ثانیه در آزمایشگاه تحقیقاتی ماده چگال دانشگاه صنعتی اصفهان استفاده شد.

برای بررسی خواص الکتریکی نمونه از دستگاه مقاومت دما پایین و دستگاه مقاومت هال غیرعادی در آزمایشگاه تحقیقاتی ماده چگال دانشگاه صنعتی اصفهان استفاده شد. ساختار بلوری به وسیله طیف پراش پرتو ایکس با طول موج CuKa مشخص شد. استوکیومتری

<sup>1</sup> Berry curvature

<sup>2</sup> Kagome lattice

<sup>3</sup> Weyl antiferromagnetic semimetals

آلیاژ توسط روش پلاسمای جفت شده القایی (ICP) اندازه گیری شد.

### بحث و بررسی

به طور کلی Mn<sub>3</sub>Sn تنها با منگنز اضافی پایدار است که محل قلع را به طور تصادفی اشغال می کند[۵]. برای پایداری آلیاژ تودهای و همچنین جبران منگنز اتلافی هنگام ذوب و بازپخت تعدادی نمونه با درصدهای وزنی ۸/۵٪، ۱۰٪ و ۱۲٪ منگنز اضافه آلیاژ سازی شد. آزمون ICP نمونه ۱۰٪ نشان می دهد که آلیاژ ساخته شده استوکیومتری Mn2.90Sn1.03 را دارد، با استفاده از نتایج نمونه ۱۰٪ نمونه ۱۲٪ با همان شرایط آلیاژ سازی شد و سپس به صورت یک قرص با قطر ۲ سانتی متر برای استفاده به عنوان نمونه هدف در لایه نشانی تبدیل شد.

پراش پرتو ایکس نمونه ۱۲٪ در مقایسه با کارت استاندارد نشان میدهد که نمونه تک فاز Mn<sub>3</sub>Sn با ساختار بلوری هگزاگونال تشکیل شده است و در تطابق با کارهای دیگران است (شکل ۱).



در ادامه به خواص ترابرد الکتریکی پرداخته میشود. شکل ۲ رفتار مقاومت الکتریکی برحسب دمای نمونه تودهای را نشان میدهد که در این نوع آلیاژها رفتار آنها از حالت خطی خارج است که مشخصه شبه فلزات پادفرومغناطیس وایل<sup>۳</sup> است.
شکل ۳ اندازه گیری مقاومت هال غیرعادی در دمای اتاق برای نمونه لایه نازک را نشان میدهد. همانطور که در رفتار آن مشخص است با تغییر کمترین میدان مغناطیسی(از ۰/۰۶ به ۰/۰۷ – تسلا) چرخش اسپین ها اتفاق میافتد و تغییر علامت میدهند که



شکل ۲: مقاومت طولی Mn3Sn بر حسب دما که از دمای ۴۵ کلوین تا دمای اتاق اندازه گیری شده است.

اندازه آن حدود  $\mu\Omega$ cm با تغییر زیرلایه ا و هچنین دمای لایه نشانی و بازپخت می توان به مقاومت هال غیرعادی بیشتر دست یافت. به طور کلی مقاومت هال غیرعادی Mn<sub>3</sub>Sn سه مولفه اصلی دارد که می توان آنها را به صورت زیر توصیف کرد:  $\rho_H = R_0 B + R_s \mu_0 M + \rho_H^{AF}$  (1)



شکل ۳: حلقه یسماند اثر هال غیرعادی در دمای اتاق

که در آن M مغناطش،  $R_0$  ضریب هال معمولی و  $R_s$  ضریب هال غیرعادی می باشد، همچنین B میدان مغناطیسی اعمالی و  $\mu$  نفوذ پذیری مغناطیسی است. در آخر  $\rho_H^{AF}$  که از ساختار اسپینی مثلثی معکوس سرچشمه می گیرد. با حذف میدان مغناطیسی همچنان مقاومت هال غیرعادی باقی می ماند که نشان می دهد اثر هال غیرعادی در پادفر ومغناطیس ها وابسته به M و B نیستند [۵].



شکل ۴: تصویر فوق مربوط به اندازهگیری ضخامت لایه نازک Mn<sub>3</sub>Sn لایه نشانی شده بر روی زیر لایه Al<sub>2</sub>O3

## نتيجهگيرى

برای ساخت آلیاژ Mn<sub>3</sub>Sn باید از ۱۲٪ وزنی منگنز بیشتر استفاده کرد تا به فاز پایدار رسید. همچنین با لایه نشانی آلیاژ Mn<sub>3</sub>Sn در دمای C<sup>0</sup>۰۰۰ بر روی زیرلایه Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> می توان مقاومت هال غیرعادی را مشاهده کرد و به مقدار μΩcm ۰/۶۵ رسید که با بهبود و تغییر شرایط ساخت می توان به مقدار بیشتری دست یافت.

مرجعها

[<sup>1</sup>] Oh, Seungjun, et al. "Controlled growth and magnetic property of aplane-oriented Mn<sub>3</sub>Sn thin films." *AIP Advances* 9, (2019), 035109.

[2] Taguchi, Y., et al. "Spin chirality, Berry phase, and anomalous Hall effect in a frustrated ferromagnet" *Science* **291** (2001) 2573-2576

effect in a frustrated ferromagnet." *Science* **291**, (2001), 2573-2576. [3] Jungwirth, Tomas, et al. "Antiferromagnetic spintronics." *Nature nanotechnology* **11**, (2016), 231-241.

[4] Baltz, Vincent, et al. "Antiferromagnetic spintronics." *Reviews of Modern Physics* **90**, (2018), 015005.

[5] Nakatsuji, Satoru, Naoki Kiyohara, and Tomoya Higo. "Large anomalous Hall effect in a non-collinear antiferromagnet at room temperature." *Nature* **527**, (2015), 212-215.





# بررسی ابتدا به ساکن جذب مولکول CO روی سطح استانن به منظور کاربرد نانوحسگر گازی امیری فدردی محبوبه <sup>۱</sup>؛ مولاروی، طیبه<sup>۱</sup>

<sup>ا</sup> دانشکاره فیزیک و مهندسی هسته ای دانشگاه صنعتی شاهرود ، میدان هفت تیر ، ،شاهرود

چکیدہ

با توجه به کاربردهای وسیع مواد دو بعدی در علوم جدید و استفاده از آنها به عنوان جاذب مواد آلاینده و سمی، مطالعه ساختار نانوصفحه استانن، مکان جذب مولکول و انرژی جذب اهمیت زیادی دارد. در این تحقیق به بررسی خواص ساختاری و الکترونی استانن ، در حالت خالص و در حالتی که مولکول کربن مونوکسید جذب سطحی استانن شده است، می پردازیم. محاسبات بر پایه نظریه تابع چگالی، با استفاده از کد محاسباتی سیستا انجام شده است. در این تحقیق گاز کربن مونوکسید را در حالتهای مختلف به استانن نزدیک کرده و جذب آنرا برای هر حالت در فواصل مختلف بررسی کردیم. نتایج بدست آمده پایدارترین حالت برهمکنش، که در آن جذب بهتری صورت میگیرد، و همچنین بهترین فاصله جذب، بین گاز و نانولوله را نشان می دهد. بهترین موقعیت جذب مرکز شش ضلعی و در حالت عمود بر سطح استانن بدست آمد. نتایج نشان می دهد که جذب مولکول گاز تأثیر بسیار کمی بر خواص الکترونی استانن می گذارد که می تواند نشان دهنده جذب فیزیکی باشد.

**واژه های کلیدی:** نانوصفحه استانن، مولکول کربن مونوکسید، نظریه تابع چگالی، جذب فیزیکی

## Ab initio study of adsorption of CO on Stanene for gas nanosensor applications

#### Amiri Fadardi, Mahboobeh<sup>1</sup>; Movlarooy, Tayebeh<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics and nuclear engineering, Shahrood University of technology, shahrood

#### Abstract

Considering the wide applications of two-dimensional materials in new sciences and their use as absorbents of polluting and toxic substances, the study of the structure of stanene nanosheet, the location of molecule adsorption and the energy of absorption is very important. In this research, we investigate the structural and electronic properties of stanene, in its pure state and after the carbon monoxide molecule is adsorbed on the surface of stanene. Calculations has been done based on the density function theory by using Siesta code. In this research, carbon monoxide gas has been approached in different states and we investigated its absorption for each state at different distances. The obtained results show the most stable mode of interaction, in which better adsorption takes place, and also the best adsorption distance between the gas and the nanotube. The best absorption position was obtained in the center of the hexagon and perpendicular to the surface of the stanene. The results show that the adsorption of CO molecule has little effect on the electronic properties of stanene, which can indicate physical adsorption.

Keywords: Stanene, Nanosensor, Carbon monoxide, Adsorption

*PACS No.* (73)

مقدمه

اخیرا مواد دو بعدی شبه گرافن با شبکهی شش گوشی با توجه به ویژگیهای منحصر بفرد و عملکرد عالی که دارند، توجه زیادی را در جامعهی پژوهشی به منظور کاربرد بالقوه در تبدیل انرژی نسل آینده و ساخت قطعات نانوالکترونیکی به خود جلب کرده اند. یکی از معروفترین این مواد گرافن است که ساختار تک لایه و دو بعدی از اتمهای کربن است. گرافن خواص شیمیایی، مکانیکی و الکترونی ویژه ای از خود نشان میدهد. گاف نواری آن بسیار کم و در حدود ميكرو الكترون ولت است و اين باعث شد كه به گرافن، عنوان نیمرسانای بدون گاف داده شود. در گرافن هر اتم کربن به سه اتم کربن دیگر تحت زاویهی ۱۲۰ درجه متصل است و یک الکترون آن آزاد است که می تواند با گروههای عاملی و یا دیگر اتمهای رادیکالی پیوند برقرار کند بنابراین یکی از کاربردهای گرافن در سنسورهای گازی است. امروزه استفاده از نانوساختارها برای شناسایی آلاینده-های زیست محیطی، روشی جدید و با بازده بالا به شمار می رود. با توجه به نوظهور بودن گرافن، استفاده از این نانوساختار در كاربردهاي مربوط به شناسايي آلايندهها، موضوعي بسيار جديد و جالب برای گروههای تحقیقاتی مختلف بوده است [1]. از عناصر دیگر گروه ۱٤، سیلسیوم و ژرمانیوم و استانیوم است. سیلیسن و ژرمنن و استانن ساختارهای دو بعدی سیلسین، ژرمانن و استانن هستند که همانند گرافن دارای ساختار لانه زنبوری هستند. با افزایش جمعیت جهانی و صنعتی شدن، آلودگی هوا ناشی از حمل و نقل، صنايع مختلف و... به طور مداوم در حال افزايش مي باشد. با توجه به ساختار لانه زنبوری گرافن و مواد دو بعدی شبه گرافنی، این مواد دارای خواص فیزیکی، شیمیایی، مکانیکی و الکترونیکی برجسته ای هستند. و به دلیل چنین طبیعت عالی، بهطور بالقوه برای برنامههای کاربردی در وسایل و قطعات نانوالکترونیک مانند حسگر نویده دهنده هستند. استانن (Stanene)، یک ماده دوبعدی جدید شبه گرافنی، به دلیل ویژگی های برجسته ی الکترونیکی توجه زیادی را به خود جلب کرده است. تفاوتی که در استانن درمقایسه با گرافن وجود دارد این است که سطح آن کاملا مسطح نیست و دارای خم شدگی است. این ماده دارای تحرک بالا، حساسیت و انتخاب پذیری عالی است و همچنین به دلیل ویژگی قلاب شدگی ساختار لانه

زنبوری استانن، این ماده گزینه ی بسیار مناسبی برای به دام انداختن مولکول ها است.

سنتز و مطالعهی استانن و خواص آن، اولین بار در سال ۲۰۱۳ توسط محققان هند ادعا شد [2]. ژانگ و همکارانش در سال ۲۰۱۵ ، سنتز موفقیت آمیز استانن را روی زیرلایهی (II1) Bi2Te3 به روش اپی تکسی گزارش کردند[3]. استانن همانند گرافن نیمرسانایی با گاف انرژی صفر است. نمودار نوارهای انرژی برای این ساختار نشان میدهد که این ساختار نیز در نقاط دیراک دارای گاف انرژی صفر است. ثابت شبکه استانن ٤/٦٢ أنگستروم و ميزان خميدگي آن ۰/۸۷ آنگستروم میباشد [4]. در تحقیقی آقای عباسی جذب مولکولهای فنل، هیدرازین و تیوفن را روی تک لایههای استانن با استفاده از نظریهی تابع چگالی مورد بررسی قرار داد [5]. موقعیت-های مختلف جذب روی تک لایهی استانن آزمایش شد. در تحقیقی دیگر محققان به مطالعه ی جذب بخارات تری متیل آمین و n-butyl آمين روى نانولوله استانن پرداختند [6]. أن ها خواص الكترونيكى نانولوله خالص و سیستم نانولوله بعد از جذب مولکول ها با استفاده از نظریه ی تابع چگالی و تابع گرین غیرتعادلی مطالعه کردند. در این تحقیق، به بررسی جذب مولکول مونوکسید کربن روی استانن ميپردازيم.

## روش محاسباتى

در این پژوهش، اثر جذب مولکول CO روی سطح استانن ، بر حسب نظریه تابع چگالی(DFT) [7]، توسط کد محاسباتی سیستا (SIESTA) ، محاسبه می شود. در این کار از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) با تابعی (PBE) استفاده می شود. جهت در نظر گرفتن تعاملات واندروالس، تصحیح واندروالس وارد شد. مجموعه پایه ها به صورت (DZP)، انرژی قطع به جهت مش بندی فضای حقیقی به صورت (DZP)، انرژی قطع به جهت مش بندی منطقه ی اول بریلوئن ۱×2×2 می باشد. برای بدست آوردن انرژی جذب سطحی مولکولCO روی استانن از رابطه ی زیر استفاده می شود:

$$E_{ads} = E_{stanene+CO} - E_{stanene} - E_{CO}$$
(')

ڎٳؿڲٳ؞ ڛۑۑ ب



شکل ۱: شماتیکی از موقعیت های مختلف جذب مولکول CO روی استانن.الف: جذب در حالت عمودی از سر اتم C بالای اتم Sn، ب: جذب در حالت افقی از سر اتم C بالای اتم Sn، ج: جذب در حالت عمودی از سر اتم C بالای مرکز شش ضلعی، د: جذب در حالت افقی از سر اتم C بالای مرکز شش ضلعی، ه: جذب در حالت عمودی بالای پیوند Sn-Sn از سر اتم C، و: جذب در حالت افقی بالای پیوند Sn-Sn از سر اتم C

همانطور که در نمودار (ب) مشاهده می شود، تغییر قابل ملاحظه ای در ساختار نواری بعد از جذب در مقایسه با ساختار نواری قبل از جذب، مشاهده نمی شود که نشان می دهد جذب مولکول CO روی استانن یک جذب فیزیکی ضعیف است.



شکل ۲: ساختار نواری استانن (راست) قبل از جذب ، (چپ)بعد از جذب

که در آن Estanene+co انرژی برهم کنش بین استانن و مولکول CO و Estanene انرژی استانن و Eco انرژی مولکول CO می باشد.

## نتايج و بحث

در این تحقیق ابتدا سلول واحد استانن بهینه شد. مقدار پارامتر شبکه برای سلول واحد ۲/٦٤ آنگستروم بدست آمد. طول پیوند بین اتم-های ۲/۸۲٤, Sn آنگستروم محاسبه شد که در تطابق خوبی با نتایج سایر محققین است[4].

در مرحله بعد جذب گاز CO را از دوسر C و O بطور جداگانه و همچنین در حالت افقی و عمودی روی ابرسلول ۱×۵×۵ استانن در مكانها وفواصل مختلف • تا ٤ أنگستروم مورد بررسي قرار گرفت. سپس این ساختارها بهینه شدند تا پایدارترین ساختار با بهترین فاصله که همان فاصله ی تعادلی است، بدست آید. هر حالت انرژی جذب را توسط رابطهی (۱) محاسبه کردیم تا بهترین موقعیت برای قرار گرفتن مولکول CO بدست آید. در شکل (۱)، نمونههایی از مکان های متفاوتی که می توان مولکول را روی سطح استانن جذب كرد نشان داده شده است. بهترين موقعيت جذب مكاني است كه انرژی جذب کمترین مقدار منفی را داشته باشد. بر این اساس بهترین موقعیت جذب زمانی است که مولکول CO از سمت اتم C در جهت افقی به مرکز شش ضلعی استانن در فاصله ی ۲/۵ آنگستروم نزدیک شود. در این حالت میزان انرژی جذب ۰/۱۲٤ الکترون ولت و میزان بار انتقالی از سمت صفحه به سمت مولکول CO، با استفاده از روش آناليز بار مولكين، ٢٠/٠ الكترون محاسبه شد. برای بررسی مکانیزم جذب CO روی استانن، ساختار نواری و چگالی حالتهای کلی و جزئی قبل و بعد از جذب، بررسی و رسم شد. همانطورکه مشاهده می شود استانن خالص یک ماده ی نیمرسانا بدون گاف نواری با مخروط های دیراک واقع در نقاط k

مى باشد.





رسم شده است. 60 50 00 (a.u.) 00 00 (a.u.) (الف) 20 10 لتتثييلينييا 0 -1 0 1 E - Ef(eV)-4 -3 -2 2 70 60 50 (ب) (a.u.) 40 DOS 30 20 10 0 E - Ef (eV) 70 60 Total 50 ("n") 40 Sn-5s (ج) Sn-5p PDOS 30 20 10 -3 0 E - Ef (eV) 70 60 total ("n") <sup>50</sup> 40 30 20 50 (د) 2p-C 2p-O 5p-sr 5s-Sn 20 -3 E - Ef (eV) شکل 3: چگالی حالتهای کلی(الف) قبل از جذب مولکول CO (ب) بعد از جذب مولکول CO. چگالی حالتهای جزئی (ج) قبل از جذب مولکول CO

در حالت کلی، مقایسهی نمودارهای چگالی حالتها قبل و بعد از جذب تغییرات اندکی را نشان میدهد. هیچی گافی پس از جذب ایجاد نشده است.

(د) بعد از جذب مولکول CO

اما پس از جذب در منحنی DOS تعداد پیک ها بیشتر از حالت قبل از جذب است همچنین در نزدیکی تراز فرمی پیک های تیزتری ایجاد شده است. با توجه به نمودارهای چگالی حالات جزئی قبل و بعد از جذب، مشاهده می شود که در نوار ظرفیت و رسانش بیشترین سهم چگالی حالت ها در حالت خالص و همچنین پس از جذب مربوط به اوربیتال های 5p اتم sn است.حالت های اطراف تراز فرمی ناشی از هیبریداسیون اوربیتال های 5s و 5p اتم sn است. نقش چگالی حالت های اوربیتال های مولکول CO ناچیز است.

نتيجه گيري

در این تحقیق جذب گاز CO از دو سر C و O در حالت های افقی و عمودی و فواصل مختلف روی استانن بررسی شد. طبق انرژی های جذب محاسبه شده، پایدارترین حالت جذب روی مرکزشش ضلعی و از سمت اتم C است. فاصله جذب در این حالت ۲/۰ آنگستروم، مقدار انرژی جذبVع ۲/۱۰ – و مقدار بار انتقالی ۰۰/۰ الکترون از صفحه به مولکول CO محاسبه شده است. خواص الکترونی استانن قبل و بعد از جذب مولکول CO بررسی شد که تغییرات بعد از جذب اندک بود. با توجه به مقدار انرژی جذب به دست آمده و میزان انتقال بار پس از جذب مولکول می توان نتیجه گرفت که جذب مولکول CO بر روی صفحه استانن ضعیف، واندروالس و جذب از نوع فیزیکی است.

مرجعها

- [1] Leenaerts, O., B. Partoens, and F. M. Peeters. "Adsorption of H<sub>2</sub>O, NH<sub>3</sub>, CO, NO<sub>2</sub>, and NO on graphene: A first-principles study." *Physical Review B* 77, No. 12 (2008) 125416.
- [2] Saxena, Sumit, Raghvendra Pratap Chaudhary, and Shobha Shukla. "Stanene: atomically thick free-standing layer of 2D hexagonal tin." *Scientific reports* 6 (2016) 31073.
- Zhu, Feng-feng, Wei-jiong Chen, Yong Xu, Chun-lei Gao, Dan-dan Guan, Can-hua Liu, Dong Qian, Shou-Cheng Zhang, and Jin-feng Jia.
   "Epitaxial growth of two-dimensional stanene." *Nature materials* 14, No. 10 (2015): 1020.
- [4] van den Broek, Bas, Michel Houssa, Emilio Scalise, Geoffrey Pourtois, V. V. Afanas'ev, and Andre Stesmans. "Two-dimensional hexagonal tin: ab initio geometry, stability, electronic structure and functionalization." 2D Materials 1, No. 2 (2014) 021004.
- [5] Abbasi, Amirali. "Adsorption of phenol, hydrazine and thiophene on stanene monolayers: A computational investigation." *Synthetic Metals* , NO. 247 (2019) 26-36.
- [6] Bhuvaneswari, R., V. Nagarajan, and R. Chandiramouli. "Adsorption studies of trimethyl amine and n-butyl amine vapors on stanene nanotube molecular device-a first-principles study." *Chemical Physics*, No. 501 (2018) 78-85.
- [7] Blaha, P., Singh, D. J., Sorantin, P. I., & Schwarz, K. "Electric-fieldgradient calculations for systems with large extended-core-state contributions." *Physical Review B*, No. 46 (1992) 1321.



## شبیه سازی جذب مولکول آرسین ( AsH3 ) روی سطح نانوروبان استانن امیری فدردی محبوبه <sup>1</sup>؛ مولاروی، طبیه<sup>1</sup>

<sup>1</sup> دانشکاده فیزیک و مهندسی هسته ای دانشگاه صنعتی شاهرود ، میدان هفت تیر ، ،شاهرود

چکیدہ

برای یافتن امکان جذب و تشخیص گاز سمی آرسین، AsH3، برهمکنش های بین AsH3 و نانوروبان استانن را با استفاده از روش نظریه تابعی چگالی و تابع گرین غیر تعادلی توسط کد سیستا و ترنسیستا بررسی کردیم. فاصله تعادلی مولکول از روبان، انرژی های جذب، مقدار بار انتقال یافته ، تغییرات الکترونی و ترابردی برای بررسی حساسیت استانن نسبت به مولکول آرسین قبل و بعد از جذب محاسبه شد. با محاسبه انرژی جذب برای موقعیت های مختلف جذب، بهترین موقعیت جذب مرکز شش ضلعی استانن نبست به مولکول آرسین قبل و بعد از جذب محاسبه شد. با محاسبه انرژی جذب برای موقعیت های مختلف جذب، که می تواند نشان دهنده جذب فیزیکی باشد. جهت بررسی بیشتر محاسبات ترابرد انجام شد و منحنی عبور و جریان ولتاژ قبل و بعد از جذب رسم شد که مقدار تغییر جریان و عبور بعد از جذب جزیی بود که نتایج انرژی جذب و تغییرات الکترونی و بار انتقال یافته را تایید می کند واژه های کلیدی: نانوروبان استانن، گاز آرسین، نظریه تابع گرین غیر تعادلی، جذب فیزیکی

### Simulation of adsorption of Arsine on the surface of Stanene nanoribbon Amiri Fadardi, Mahboobeh<sup>1</sup>; Movlarooy, Tayebeh<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics and nuclear engineering, Shahrood University of technology, shahrood

#### Abstract

To find the possibility of adsorption and detecting the toxic gas of  $AsH_3$ , we have studied the interactions between  $AsH_3$  and stanene nanoribbon using density functional theory and non-equilibrium Green's function by Siesta and Transiesta codes. The equilibrium distance of the molecule from the ribbon, adsorption energies, charge transfer, electron and transport changes were calculated to investigate the sensitivity of stanene to arsine molecule before and after adsorption. By calculating the adsorption energy for different adsorption positions, the best adsorption site at the hexagonal stanene center was obtained. The results show that the adsorption of arsine molecule has little effect on the electronic properties of stanene, which can indicate physical adsorption. In order to further investigate the current-voltage and transmission curves before and after adsorption, the amount of change in current and transmission after adsorption was a component that confirms the results of adsorption energy and charge transfer and electronic properties.

*Keywords*: Stannene nanoribbon, Arsine gas, density function theory, non-equilibrium Green's function, physical absorption

*PACS No.* (72)

بالایی برخوردار است. نانوحسگرها به دلیل نگرانی حاضر در مورد مسائل زیست محیطی و بهداشتی توجه چشمگیری را به خود جلب کرده اند. اخیرا مواد دو بعدی شبه گرافن با شبکهی شش گوشی با توجه به ویژگیهای منحصر بفرد و عملکرد عالی که دارند، توجه زیادی را در جامعهی پژوهشی به منظور کاربرد بالقوه در تبدیل انرژی نسل

مقدمه

انتشار AsH3 به دلیل سمی بودن و فرار بودن اثرات زیادی روی سلامتی و محیط زیست دارد[1]. هنگامی که مقدار اندکیAsH3 استنشاق می شود، باعث مسمومیت حاد و طولانی مدت یا بیماری مزمن مانند آرسنیکوز می شود. بنابراین، حذف این آلاینده از اهمیت ڎٳؿڲٳڹ ڛۑۑڹ ب

> آينده و ساخت قطعات نانوالكترونيكي به خود جلب كرده اند. يكي از معروفترین این مواد گرافن است که ساختار تک لایه و دو بعدی از اتمهای کربن است. گرافن خواص شیمیایی، مکانیکی و الکترونی ویژه ای از خود نشان میدهد. گاف نواری آن بسیار کم و در حدود میکرو الکترون ولت است و این باعث شد که به گرافن، عنوان نیمرسانای بدون گاف داده شود. در گرافن هر اتم کربن به سے اتم کربن دیگر تحت زاویهی 120 درجه متصل است و یک الکترون آن آزاد است که می تولند با گروههای عاملی و یا دیگر اتمهای رادیکالی پیوند برقرار کند بنابراین یکی از کاربردهای گرافن در سنسورهای گازی است. امروزه استفاده از نانوساختارها برای شناسایی آلاینده های زیست محیطی، روشی جدید و با بازده بالا به شــمار مي رود. با توجه به نوظهور بودن گرافن، اســتفاده از این نانوساختار در کاربردهای مربوط به شیناسایی آلایندهها، موضوعي بسيار جديد و جالب براي گروههاي تحقيقاتي مختلف بوده است. از عناصر دیگر گروه 14، سیلسیوم و ژرمانیوم و استانیوم است. سیلیسن و ژرمنن و استانن ساختارهای دو بعدی سیلسین، ژرمانن و استانن هستند که همانند گرافن دارای ساختار لانه زنبوری هستند. با افزایش جمعیت جهانی و صنعتی شدن، آلودگی هوا ناشی از حمل و نقل، صنایع مختلف و... به طور مداوم در حال افزایش می باشد. با توجه به ساختار لانه زنبوری گرافن و مواد دو بعدی شبه گرافنی، این مواد دارای خواص فیزیکی، شــيميايي، مكانيكي و الكترونيكي برجســته اي هســتند. و به دليل چنین طبیعت عالی، بهطور بالقوه برای برنامههای کاربردی در وسایل و قطعات نانوالکترونیک مانند حسگر نویده دهنده هستند. استانن (Stanene)، یک ماده دوبعدی جدید شبه گرافنی، به دلیل ویژگی های برجسته ی الکترونیکی توجه زیادی را به خود جلب کرده است. تفاوتی که در استانن درمقایسه با گرافن وجود دارد این است که سطح آن کاملا مسطح نیست و دارای خم شدگی است. این ماده دارای تحرک بالا، حساسیت و انتخاب پذیری عالی است و همچنین به دلیل ویژگی قلاب شــدگی ســاختار لانه زنبوری استانن، این ماده گزینه ی بسیار مناسبی برای به دام انداختن مولكول ها است.

سنتز و مطالعهی استانن و خواص آن، اولین بار در سال 2013 توسط محققان هند ادعا شد [2]. ژانگ و همکارانش در سال 2015 ، سنتز موفقیت آمیز استانن را روی زیرلایهی (Bi2Te3 (111) به روش اپی تکسی گزارش کردند[3]. استانن همانند گرافن نیمرسانایی با گاف انرژی صفر است. نمودار نوارهای انرژی برای این ساختار نشان میدهد که این ساختار نیز در نقاط دیراک دارای گاف انرژی صفر است. ثابت شبکه استانن 4/62 آنگستروم و میزان خميدگي آن 0/87 آنگستروم ميباشد [4]. در تحقيقي آقاي عباسي جذب مولکول،های فنل، هیدرازین و تیوفن را روی تک لایههای استانن با استفاده از نظریهی تابع چگالی مورد بررسی قرار داد. موقعیتهای مختلف جذب روی تک لایهی استانن آزمایش شد. در تحقیقی دیگر محققان به مطالعه ی جذب بخارات تری متیل آمین وn-butyl آمين روى نانولوله استانن يرداختند. آن ها خواص الكترونيكي نانولوله خالص و سيستم نانولوله بعد از جذب مولكول ها با استفاده از نظریه ی تابع چگالی و تابع گرین غیرتعادلی مطالعه کردند. در این تحقیق، به بررسی جذب مولکول آرسین روی نانوروبان آرمچير استانن با عرض 6 ميپردازيم.

## روش محاسباتى

در این پژوهش، اثر جذب مولکول آرسین روی سطح نانوروبان استانن ، بر حسب ترکیبی از نظریه تابع چگالی(DFT)[5] و تابع گرین غیر تعادلی(NEGF) توسط کد محاسباتی سیستا(SIESTA) [6] و ترنسیستا (Transiesta) [7] محاسبه می شود. در این کار از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) با تابعی (PBE) استفاده می شود. جهت در نظر گرفتن تعاملات واندروالس، تصحیح واندروالس جهت در نظر گرفتن تعاملات واندروالس، تصحیح واندروالس قطع به جهت مش بندی فضای حقیقی S50Ry و تعداد نقاط K برای مش بندی منطقه ی اول بریلوئن S50x می باشد. برای بدست آوردن انرژی جذب سطحی مولکولCO روی استان از رابطه ی زیر استفاده می شود:



که در آن Estanene+AsH3 انرژی برهم کنش بین استانن و مولکول و Estanene+AsH3 انرژی استانن و EAsH3 انرژی مولکول آرسین می یاشد.

رابطه تابع انتقال سیستم بصورت زیر است که در آن E انرژی، Vb ولتاز بایاس و G تابع گرین است. (Γ <sub>L(R</sub> جفت شدگی بین الکترودها و ناحیه پراکندگی را نشان می دهد.

 $T(E,Vb) = TR [\Gamma L (E, Vb) G(E, Vb) \Gamma R(E, Vb) G + (E, Vb)]$ (2)

برای محاسبه جریان از رابطه زیر استفاده می شود[9].  

$$I(Vb) = G0 \int_{\mu R}^{\mu L} T(E, V_b) [f(E - \mu_l) - f(E - \mu_R) dE$$
(3)

که در آن (E) احتمال گذار الکترون های با انرژی E است .

نتايج و بحث

در این تحقیق ما ابتدا سلول واحد نانوروبان استانن را بهینه کردیم. مقدار پارامتر شبکه برای سلول واحد 8/09 آنگستروم بدست آمد. طول پیوند بین اتمهای Sn , 2/824 آنگستروم محاسبه شد که در تطابق خوبی با نتایج سایر محققین است.

در مرحله بعد جذب گاز AsH3 را روی نانوروبان هیدروژنه  $8 \times 8$ استانن با عرض 6 (HASnNR) در مکانها وفواصل مختلف 0 تا 4 آنگستروم مورد بررسی قرار داده ایم. سپس این ساختارها را بهینه کردیم تا پایدارترین ساختار با بهترین فاصله که همان فاصله ی تعادلی است، بدست آید. هر حالت انرژی جذب را توسط رابطهی (1) محاسبه کردیم تا بهترین موقعیت برای قرار گرفتن مولکول آرسین بدست آید. در شکل (1)، نمونههایی از مکان های متفاوتی که می توان مولکول را روی سطح استانن قرار داد نشان داده شده است. بهترین موقعیت جذب مکانی است که انرژی جذب است. بر این اساس بهترین موقعیت جذب زمانی است که مولکول آرسین از سمت اتم AS به مرکز شش ضلعی استان در فاصله ی 3/5

الکترون ولت و مقدار بار انتقالی 0/056 الکترون الکترون **از** سمت مولکول آرسین به سمت صفحه محاسبه شد.



ب: جذب بالای اتم Sn، ج: جذب بالای پیوند Sn-Sn

برای بررسی مکانیزم جذب آرسین روی استانن، ساختار نواری قبل و بعد از جذب، بررسی و رسم شد. برای محاسبهی ساختار نواری ابتدا محاسبات خود سازگار انجام میشود تا انرژی فرمی بدست آید. در نمودارهای ساختار نواری، سطح انرژی صفر بیانگر موقعیت تراز فرمی میباشد که با خط افقی مستقیم نشان داده شده است. ساختار نواری ساختار موردبررسی قبل و بعد از جذب مولکول آرسین در شکل 2 رسم شده است.



آرسین (ج) نانوربان استانن بعد از جذب.

همانطور که در نمودار (الف) مشاهده می شود، نانوروبان استانن با عرض 6 دارای گاف نواری مستقیم 0/37 الکترون ولت است. در نموار (ب) ساختار نواری مولکول آرسین رسم شده است. همانطور که مشاهده می شود در اطراف تراز فرمی ساختار این مولکول دارای نوار انری نیست. ساختار نواری استانن بعد از جذب در نمودار (ج)



رسم شده است. تغییر قابل ملاحظه ای در ساختار نواری بعد از جذب در مقایسه با ساختار نواری قبل از جذب، مشاهده نمی شود، تغییر گاف نواری بسار جزیی و در محدوده هزارم الکترون ولت می باشد . نتایج نشان می دهد جذب مولکول آرسین روی نانوروبان استانن یک جذب فیزیکی است.

در مرحله بعد محاسبات ترنسیتا انجام شد. برای این منظور ساختار مورد بررسی بین دو الکترود قرار گرفت و جذب مولکول در ناحیه پراکندگی انجام شد. شکل 3 تصویر شماتیکی از اتصال الکترودها و ناحیه پراکندگی مرکزی را نشان می دهد.



شکل 3: شماتیکی از ستاپ نانوحسگر استانن نشان دهنده مناطق الکترود نیمه نامتناهی چپ و راست و منطقه پراکندگی مرکزی.





شکل 4: (الف) منحنی عبور نانوروبان استانن قبل و بعد از جذب آرسین (ب ) منحنی جریان– ولتاژ نانوروبان استانن قبل و بعد از جذب آرسین

تاثیر جذب بر منحنی عبور بسیار جزیی است. همچنین مقدار جریان به ازای ولتاژهای 0 تا 1 ولت محاسبه شد. مقدار جریان به ازای ولتاژ 1 ولت 21 میکروآمپر محاسبه شد. منحنی جریان پس از جذب تقریبا بر منحنی جریان قبل از جذب منطبق است و تغییرات جریان ناچیز است که نشان دهنده ی جذب ضعیف مولکول آرسین روی نانوروبان استانن با عرض 6 است که نتایج انرژی جذب و تغییرات ساختار نواری را پس از جذب، تایید می کند.

## نتيجه گيرى

در این تحقیق جذب گاز آرسین روی نانوروبان استانن بررسی شد. طبق انرژی های جذب محاسبه شده، پایدارترین حالت جذب روی مرکزشش ضلعی به فاصله 2/5 آنگستروم و مقدار انرژی جذب v مرکزشش ضلعی به مقدار بار انتقالی 0/056 الکترون از سمت مولکول آرسین به سمت صفحه محاسبه شد. تغییرات جزیی خواص الکترونی و ترابردی نانوروبان استانن قبل و بعد از جذب مولکول آرسین بررسی شد. نتایج بررسی ها نشان می دهد برهمکنش آرسین و استانن از نوع فیزیکی است و از استانن می توان به عنوان حسگر قابل بازیافت آرسین استفاده کرد.

مرجعها

- [1] Jiang, M., Bai, Y., Ning, P., Huang, X., Liu, H., & Fu, J. (2015). Adsorption removal of arsine by modified activated carbon. Adsorption, 21(1), 135-141.
- [2] Saxena, Sumit, Raghvendra Pratap Chaudhary, and Shobha Shukla. "Stanene: atomically thick free-standing layer of 2D hexagonal tin." Scientific reports 6 (2016): 31073.
- [3] Zhu, Feng-feng, Wei-jiong Chen, Yong Xu, Chun-lei Gao, Dan-dan Guan, Can-hua Liu, Dong Qian, Shou-Cheng Zhang, and Jin-feng Jia. "Epitaxial growth of two-dimensional stanene." *Nature materials* 14, no. 10 (2015): 1020.
- [4] van den Broek, Bas, Michel Houssa, Emilio Scalise, Geoffrey Pourtois, V. V. Afanas'ev, and Andre Stesmans. "Two-dimensional hexagonal tin: ab initio geometry, stability, electronic structure and functionalization." 2D Materials 1, no. 2 (2014): 021004
- [5] Blaha, P., Singh, D. J., Sorantin, P. I., & Schwarz, K. (1992). "Electricfield-gradient calculations for systems with large extended-core-state contributio"ns. Physical Review B, 46(3), 1321.
- [6]Soler, J. M., Artacho, E., Gale, J. D., García, A., Junquera, J., Ordejón, P., & Sánchez-Portal, D. (2002). "The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation".
- [7] Brandbyge, M., Mozos, J. L., Ordejón, P., Taylor, J., & Stokbro, K. (2002). Density-functional method for nonequilibrium electron transport. Physical Review B, 65(16), 165401.
- [8] Grimme, S. (2006). "Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction. Journal of computational chemistry", 27(15), 1787-1799.
- [9] Büttiker, M. (1986). Four-terminal phase-coherent conductance. Physical review letters, 57(14), 1761.





# تاثیر MnO<sub>2</sub> بر ویژگی های ساختاری و ظرفیت ویژه g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> لایهنشانی شده بر فوم نیکل سلطانی، حامد'؛ بحیرائی، حامد'؛ قاسمی، شهناز' <sup>'</sup>گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه دانشگاه ملایر <sup>'</sup> پژوهشکده انرژی، آب و محیط زیست دانشگاه صنعتی شریف

## چکیدہ

در این مقاله از ترکیب P-C<sub>3</sub>N4 و MnO2 و MnO2 یک الکترود هیبریدی جهت به کارگیری در ابرخازن تهیه شد. ابتدا نانوصفحات P-C<sub>3</sub>N4 یا استفاده از روش الکتروفورتیک بر روی فوم نیکل لایه نشانی شدند. سپس توسط روش الکتروانباشت نانوذرات MnO2 بر روی لایه ی قبلی، لایهنشانی شدند. برای بررسی مشخصه های ساختاری و میکروساختاری الکترود تهیه شده از آنالیزهای Raman FT-IR XRD و FE-SEM استفاده شد. الگوی های XRD نشان داد که الکترود تهیه شده، ترکیبی کامپوزیتی از P-C<sub>3</sub>N4 و MnO2 میباشد همچنین تصاویر FE-SEM توزیع مناسب نانوذرات MnO2 را بر روی نانوصفحات MO2 نشان داد که الکترود تهیه شده، ترکیبی کامپوزیتی الکتروشیمیایی، ظرفیت ویژه الکترودهای FE-SEM و MnO2 و MnO2 را بر روی نانوصفحات MO2 نشان داد که الکترود تهیه شده، ترکیبی کامپوزیتی الکتروشیمیایی، ظرفیت ویژه الکترودهای P-C<sub>3</sub>N4/MnO2 و P-C<sub>3</sub>N4 استفاده شد. الگوی می TO/4 Fg<sup>-1</sup> به تشان میده کامپوزیت تهیه شده از آنالیزهای الکتروشیمیایی، ظرفیت ویژه الکترودهای P-C<sub>3</sub>N4/MnO2 و P-C<sub>3</sub>N4 و O-C<sub>3</sub>N4 و PO/4 Fg<sup>-1</sup> به تشان میدهد کامپوزیت تهیه شده عملکرد

واژه های کلیدی: ابرخازن، کربن نیترید گرافیتی، اکسید منگنز، الکتروانباشت، الکتروفورتیک.

# The effect of $MnO_2$ on the structural and specific capacitance of $g-C_3N_4$ nanosheets deposited on nickel foam substrate

#### Soltani, Hamed<sup>1</sup>; Bahiraei, Hamed; Ghasemi, Shahnaz<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Faculty of Science, Malayer University, Malayer <sup>2</sup> Sharif Energy, Water and Environment Institute, Sharif University of Technology

#### Abstract

In this article, the combination of two materials  $g-C_3N_4$  and  $MnO_2$  was used to prepare the supercapacitor hybrid electrode. First,  $g-C_3N_4$  nanosheets were deposited on the nickel foam substrate by electrophoretic method. In the following,  $MnO_2$  nanoparticles were deposited on the substrate by electro-deposition methods. XRD, FT-IR, Raman and FE-SEM analyzes were used to investigate the structural and microstructural characteristics of the prepared electrode. XRD patterns showed that the prepared electrode is a composite combination of  $g-C_3N_4$  and  $MnO_2$ , and FE-SEM images confirmed the proper distribution of  $MnO_2$ nanoparticles on  $g-C_3N_4$  nanosheets. Using electrochemical analysis, the specific capacity of  $MnO_2/g-C_3N_4$  and  $g-C_3N_4$  electrodes, were obtained as 59.5 and 35.9 Fg<sup>-1</sup>, respectively, which shows that the prepared composite has a better performance than the  $g-C_3N_4$  electrode.

*Keywords*: Supercapacitor, g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, MnO<sub>2</sub>, Electrodeposition, Electrophoretic.

دستگاههای ذخیرهسازی انرژی مانند سلولهای سوختی و باتریها، امیدوارکنندهترین ذخیرهساز هستند [۲]. مکانیسم ذخیره انرژی SC ها تأثیر بسزایی بر ویژگی ها و عملکرد دارد. دو نوع اصلی از SC ها خازن الکتریکی دو لایه (EDLC) و شبه خازن فارادایی هستند. در EDLC، انرژی به دلیل جذب یون ها در سطح مشترک

امروزه، توسعه دستگاه های ذخیره انرژی جدید مورد توجه گسترده محققان قرار گرفته است [۱]. ابرخازنها به دلیل ویژگیهای خاص خود مانند توانایی شارژ سریع، عمر چرخه طولانی، چگالی توان و چگالی انرژی بالا، در میان سایر

مقدمه



الکترود (الکترولیت) ذخیره می شود، در حالی که در شبه خازن، انرژی از طریق واکنش های ردوکس سطحی برگشت پذیر و سریع ذخیره می شود [۳، ۴].

کربن نیترید گرافیتی (g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>) یک پلیمر مزدوج بدون فلز است که به دلیل ساختار متخلخل، پایداری شیمیایی و حرارتی خوب، غیر سمی بودن و هزینه کم، توجه زیادی را در دستگاه های ذخیره انرژی به خود جلب کرده است [۵]. ساختار نیترید کربن گرافیتی همانند لایههای گرافیت است که در آن پیوندهای کووالانسی N-C در موقعیت پیوندهای C-C جایگزین می شوند و لایهها توسط نیروهای واندروالس در کنار هم نگه داشته می شوند[۶]. در میان روشهای مختلف برای لایه نشانی کربن نیترید گرافیتی، روش الکتروفورتیک به دلیل عدم نیاز به بایندر مورد توجه قرار گرفته است. رسوب دهی الکتروفورتیک' (EPD) یکی از روشهای پوششدهی مهم بر پايهی رسوبدهی الکتريکی است. الکتروفورتیک یک فرآیند دو مرحلهای است. در مرحلهی اول، ذرات باردار موجود در محيط مايع، به سمت الكترود با بار مخالف حركت ميكنند. اين حركت به دليل وجود ميدان الكتريكي خارجي ایجاد میشود. در مرحله ی دوم، ذرات بر روی الکترودها رسوب میکند و یک لایهی ضخیم تشکیل می شود. ضخامت لایه به شرايط فرايند (غلظت ذرات موجود در سوسپانسيون، ميدان الكتريكي اعمالي و زمان) وابسته است. در اينجا، زيرلايه به عنوان يك الكترود عمل مي كند [٧].

از آنجایی که g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> بالک به دلیل رسانایی کم و مساحت سطح ویژه، ظرفیت مضاعف الکتریکی پایینی را نشان می دهد، [۸، ۹] عامل دار کردن g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> با اکسیدهای فلزی روشی مناسب برای بهبود ظرفیت ابرخازن ها است [۱۰]. در میان اکسیدهای فلزات واسطه، نانوساختارهای MnO<sub>2</sub> مواد مناسبی برای کاربردهای ابرخازن به دلیل مسیر رسانش کوتاهتر برای الکترونها و یونها، مساحت سطح بالاتر، رسانایی الکتریکی نسبتاً بالا و غیرسمی بودن هستند [۱۱]. بنابراین، اتصالات ناهمگون MnO<sub>2</sub>/g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> می تواند ماده مناسبی برای کاربردهای عملی ابرخازن در آینده باشد

[۱۲]. برای لایه نشانی MnO<sub>2</sub> روش های مختلفی نظیر قطرهریزی، هیدروترمال، پیرولیز پاششی فراصوت، الکتروانباشت مورد استفاده قرار گرفته است. روش های الکتروانباشت به دلیل لایهنشانی همزمان از پیش ماده و سادگی، بسیار مورد استفاده قرار گرفتهاند. در این تحقیق، الکترود کار ابرخازن با استفاده از رسوب دهی نانوذرات MnO<sub>2</sub> به روش الکتروانباشت بر روی نانو صفحات نانوذرات g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> به روش الکتروفورتیک بر روی فوم نیکل ساخته شد و عملکرد ابرخازنی آن بررسی شد.

## روشهای آزمایشگاهی سنتز و و رسوبدهی MnO<sub>2</sub>

برای سنتز g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> از روش کلسینه کردن پودر ملامین استفاده شد. یک بوته آلومینا سرپوشیده حاوی ۱۰ گرم پودر ملامین (Merck، %99) در یک کوره مکعبی قرار داده شد. دما به ۵۵۰ درجه سانتیگراد (۲ درجه سانتیگراد در دقیقه) افزایش یافت، به مدت ۶ ساعت نگهداری شد و سیس به طور طبیعی تا دمای محیط خنک شد. برای تهیه الکترود، ۱۲ میلی گرم پودر زرد رنگ g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> و ۱۰ میلی گرم (AL(NO<sub>3</sub>) در ۲۵ میلی لیتر آب شرب شهری به اضافه ۱۰ میلی لیتر اتانول و چند قطره اسید نیتریک. مخلوط و سونيكيت شد. الكترود فوم نيكل ۱\*۱ بعنوان الكترود كار و الكترود پلاتين بهعنوان شمارنده استفاده شد. ولتاژ استفاده شده ۱۰ ولت و به مدت ۳۰ دقیقه اعمال شد. سیس نمونه شستشو و خشک شد. برای تهیه الکترود کامپوزیتی از روش الکتروانباشت استفاده شد. محلول ۰/۰۱ مولار KMnO<sub>4</sub> بدون هیچ ماده اضافی تهیه شد. در روش الکتروانباشت کاتدی، الکترود g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> بهعنوان الكترود كار و الكترود پلاتين بهعنوان شمارنده و محلول KMnO<sub>4</sub> بهعنوان الكتروليت استفاده شد. الكترود كامپوزيتي با اعمال ولتاز ۱۰ ولت و زمان ۱ دقیقه تهیه شد.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>- Electrophretic







شكل ۱: شماي كلي ساخت الكترود كامپوزيت g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/MnO<sub>2</sub>

بحث و نتیجه گیری

روند تهیه الکترود کامپوزیتی در شکل ۱ نشان داده است. شکل ۲ تصاویر XRD و FTIR و رامان پودر g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> و MnO<sub>2</sub> را نشان میدهد. نتایج بدست از آین مشخصهیابیها نشان میدهد مواد مورد نظر بهدرستی سنتز شدهاند.



شکل۲: الف- طیف XKD، ب- طیف ۲۱-۱۲، ج- طیف رامان نمونههای پودر MnO<sub>2</sub> و g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>

شكل شماره ۳ تصاویر FE-SEM گرفته شده از الكترودهای تهیه شده از MnO<sub>2</sub> به روش الكتروفورتیک، MnO<sub>2</sub> به روش الكتروانباشت، و الكترودهای كامپوزیتی تهیه شده با روش الكتروفورتیک MnO<sub>2</sub> و الكتروانباشت نانوذرات MnO<sub>2</sub> را نشان میدهد. همانطور كه مشاهده می شود ذرات MnO<sub>2</sub> تنها بصورت میدهد. همانطور كه مشاهده می شود ذرات MnO<sub>2</sub> تنها بصورت لایههای متخلخل روی فوم رسوب كردهاند. در نمونه كامپوزیتی مشاهده می شود نانوذرات MnO<sub>2</sub> بصورت گلمانند بر روی نانوصفحات g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> تشكیل شدهاند.



شكل ۳: تصاویر FE-SEM الكترودهای، الف-ب:hnO<sub>2</sub> ، ج-د: MnO<sub>4</sub>، ه-و: كامپوزیت g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/MnO

شکل ۴ منحنیهای ولتامتری چرخهای و گالوانواستاتیک شارژ-دشارژ الکترودهای g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/MnO<sub>2</sub> رسوب شده بر روی فوم نیکل به روش الکتروانباشت را در الکترولیت آبی KOH نشان میدهد.

رفتار الکتروشیمایی نمونه تهیه شده توسط آزمونهای CV و GCD مورد بررسی قرار گرفت. شکل ۴ الف نمودار CV الکترود GCD مورد بررسی قرار گرفت. شکل ۴ الف نمودار CV الکترود  $g-C_3N_4/MnO_2$  در سرعت روبش های <sup>1-</sup> mVs سان دهنده واکنش میدهد. وجود قلههایی در منحنی CV نشان دهنده واکنش اکسایش/کاهش و رفتار شبه خازنی در نمونه است. از طرفی شکل نمودار CV نشان دهندهی ترکیبی از رفتار خازنی و شبه خازنی الکترود است، اما با توجه به نتایج الکتروشیمی ماده  $g-C_3N_4$ می دهد؛ در نمونه کامپوزیت مکانیزم فارادیک در ذخیرهسازی بار غلبه دارد. برای بررسی بیشتر رفتار الکتروشیمیایی الکترود، منحنیهای GCD نمونه در چگالی جریانهای <sup>1-</sup> Ag دا–۵/۰ در شکل ۴ب رسم شده است.



بخش اکسایش و کاهش نمودار شباهت زیادی به یکدیگر دارنـد و تقارن موجود نشان از عملکرد مناسب نمونه دارد. وجود برآمـدگی



کلاه مانند ضعیف در نمودار GCD در توافق با منحنی CV، نشان از فرایند اکسایش/کاهش ضعیف در نمونه است.

جدول ۱: ظرفیت ویژه الکترودهای تهیه شده بر حسب GCD

الكترود	C <sub>F</sub> at 0.5 Ag <sup>-1</sup>	C <sub>F</sub> at 1 Ag <sup>-1</sup>	C <sub>F</sub> at 2 Ag <sup>-1</sup>	C <sub>F</sub> at 3 Ag <sup>-1</sup>	C <sub>F</sub> at 5 Ag <sup>-1</sup>	C <sub>F</sub> at 10 Ag <sup>-1</sup>
$gCN_{EPD}/M_{ED}$	۵۹/۴۸	۵۱/۳۶	4./21	۳۳/۸۱	26/9	۱۵
gCN <sub>EPD</sub>	۳۵/۸۵	۳۰/۱۹	۲۸/۸۶	26/92	۲۰/۱۱	١٢

ظرفیتهای ویژه الکترود تهیه شده بر حسب نمودار GCD الکترود در جدول ۶-۲ ثبت شده است. نتایج نشان میدهد که ظرفیت ویژه ی الکترود از <sup>1-</sup> A9/۴۸ Fg در <sup>1-</sup> Ag ۰/۰ به <sup>1-</sup> Fg ۱۵ Fg در <sup>1-</sup> Ag ۱۰ کاهش مییابد.



 $g\text{-}C_3N_4/MnO_2$ 

در شکل ۵ الف و ب منحنی های CV و GCD الکترودهای تهیه شده از g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> و MnO<sub>2</sub>/g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> با یکدیگر مقایسه شدهاند. همانطور که در شکل ۵ الف دیده می شود با کامپوزیت کردن دو

ماده مساحت منحنی افزایش یافته که نشان دهنده ظرفیت بالاتر آن نسبت به نمونه حاوی کربن نیترید است. در شکل ۵ ب نیز مشاهده می شود که نمونه کامپوزیتی فروافت بالاتری نسبت به نمونه تهیه شده از کربن نیترید دارد که بیانگر عملکرد بهتر و بهینه-تر شدن نمونه کامپوزیتی است.

## نتيجه گيرى

در این تحقیق الکترود کامپوزیتی g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/MnO<sub>2</sub> تهیه و مورد بررسی قرار گرفت. ماده کربن نیترید به روش الکتروفورتیک بر روی فوم نیکل رسوب دهی شد و پس از آن ماده MnO<sub>2</sub> به روش الکترو انباشت بر روی g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> لایه نشانی شد. با مقایسه دو الکترود g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/MnO<sub>2</sub> حالص و کامپوزیت g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/MnO<sub>2</sub> مشخص شد که در حالت کامپوزیتی عملکرد ابرخازنی الکترود کامپوزیتی نسبت به الکترود خالص بهبود یافته است.

### مرجعها

[1]. Cheng, Q., et al., Graphene and nanostructured MnO<sub>2</sub> composite electrodes for supercapacitors. Carbon, 2011. **49**(9): p. 2917-2925.

[2]. Guo, W., et al., A Novel CVD Growth of g- $C_3N_4$  Ultrathin Film on NiCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub> Nanoneedles/Carbon Cloth as Integrated Electrodes for Supercapacitors. ChemElectroChem, 2018. 5(22): p. 3383-3390.

[3]. Chang, X., et al.,  $MnO_2/g-C_3N_4$  nanocomposite with highly enhanced supercapacitor performance .Nanotechnology, 2017. 28(13): p. 135705. [4]. Yu, D., et al., Emergence of fiber supercapacitors. Chemical Society Reviews, 2015. 44(3): p. 647-662.

[5]. Chang, X., et al.,  $MnO_2/g$ - $C_3N_4$  nanocomposite with highly enhanced supercapacitor performance. Nanotechnology, 2017. **28**(13): p. 135705.

[6], Sanati, S. and Z. Rezvani,  $g-C_3N_4$  nanosheet@CoAl-layered double hydroxide composites for electrochemical energy storage in supercapacitors. Chemical Engineering Journal, 2019. **362**: p. 743-757.

[7].Kalinina, E.G. and E.Y. Pikalova, New trends in the development of electrophoretic deposition method in the solid oxide fuel cell technology: theoretical approaches, experimental solutions and development prospects. Russian Chemical Reviews, 2019. 88(12): p. 1179.

[8]. Tahir, M., et al., *Multifunctional g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> nanofibers: a template-free fabrication and enhanced optical*, electrochemical, and photocatalyst properties. ACS Appl Mater Interfaces, 2014. 6(2): p. 1258-65.

[9]. Yu, G., et al., *Hybrid nanostructured materials for high-performance electrochemical capacitors. Nano Energy*, 2013. 2(2): p. 213-234.

[10] Sun, S., et al.,  $MnO_2/g-C_3N_4@PPy$  nanocomposite for highperformance supercapacitor. Materials Letters, 2019. 236: p. 558-561.

[11]. Fu, Y., et al., *High-performance NiO/g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> composites for visible-light-driven photocatalytic overall water splitting*. Inorganic Chemistry Frontiers, 2018. 5(7): p. 1646-1652.

[21]. Shan, Q.Y., et al., Single atom (K/Na) doped graphitic carbon Nitride@ $MnO_2$  as an efficient electrode Material for supercapacitor. Materials Letters, 2017. 202: p. 103-106.





# مطالعهٔ ابتدا به ساکن پایداری مکانیکی و ویژگیهای کشسانی انبوههٔ هالوژنهای نقره AgX (X=Br and I)

### موالیزاده، سندس؛ علی اکبری، امیر ۱

ا گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران

## چکیدہ

در این مقاله پایداری مکانیکی و خواص کشسانی انبوههٔ هالوژنهای نقره (AgX (X=Br and I از جمله ثابتهای کشسانی، مدول حجمی، مدول یانگ، فاکتور ناهمسانگردی زینر و نسبت پواسون در فاز نمک سنگی مورد مطالعه قرار گرفته است. محاسبات بااستفاده از روش شبه پتانسیل بر پایه نظریهٔ تابعی چگالی باتقریب شیب تعمیم یافته انجام گرفته است. نتایج بدست آمده نشان می دهد که ترکیب AgI نسبت به AgBr از سختی بیشتری برخوردار است. از سوی دیگر، نسبت پواسون نشان داده است که ترکیب AgBr انعطاف پذیری بیشتری نسبت به AgI دارد و شکل پذیرتر است.

واژه های کلیدی: خواص مکانیکی، هالوژن های نقره، نظریه تابعی چگالی

# Ab-initio study of mechanical stability and elastic properties bulk of silver halides AgX (X = Br and I)

#### Mavalizadeh, Sondos; Aliakbari, Amir<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran

#### Abstract

In this paper, the mechanical stability and elastic properties bulk of silver halides AgX (X = Br and I) such as the elastic constants, bulk modulus, Young's modulus, Zener anisotropy factor and Poisson's ratio in rock salt phase are studied. The calculations have been performed using the Pseudopotential method based on the density functional theory (DFT) with generalized gradient approximation (GGA). The results show that the AgI compounds harder than the AgBr compound. On the other hand, the Poisson ratio has shown that the AgBr compound has more flexibility than AgI and is more ductile.

Keywords: Mechanical properties, Silver halides, Density Functional Theory

PACS No.

ورتسایت، بلندروی، نمک سنگی و سزیم کلرید با گروههای فضایی Fm3m ،F43m ،P63mc و Pm3m میباشند. از آنجایی که این مواد در برابر نور و تابش حساسیت زیادی از خود نشان میدهند، از آنها در تصویر برداری پزشکی استفاده می شود. در واقع، مطالعه خواص ساختاری و الکترونی نقطه شروع اساسی در مطالعه و طراحی تمام قطعات الکترونیکی مانند دیودهای لیزری،

مقدمه

هالیدهای نقره ترکیبات پرکاربردی هستند که در صنایع مختلف مانند اجزای اصلی مواد عکاسی [۱]، به عنوان نیمه هادی-های مایع [۲]، به عنوان الکترولیت های جامد [۳]، به عنوان فرآیندهای فتوشیمیایی و الکتروشیمیایی [٤] و به عنوان کاربردهای پوششی استفاده می شوند [۵]. هالوژنهای نقره دارای چهار فاز

دیودهای نوری و سلولهای خورشیدی نورولتایی است [7]. در سال ۲۰۱۹ خواص اپتیکی هالوژنهای نقره از جمله سهم حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک ، ضریب شکست ، ضریب بازتاب و ضریب جذب در فاز نمک سنگی مورد مطالعه قرار گرفته است [۷]. فاز نمک سنگی یکی از سادهترین و کاملترین شبکههای کریستالهای یونی است که مورد مطالعه قرار گرفته است.

## روش محاسبه

در کار حاضر، محاسبات با استفاده از روش ابتدابهساکن در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی توسط بستهٔ محاسباتی کوانتوم اسپرسو با استفاده از تقریب شیب تعمیمیافته (GGA) [۸] برای مدل سازی پتانسیل تبادلی-همبستگی انجام گرفته است. در این بستهٔ محاسباتی، معادلات تک ذرهٔ کوهن-شم [۹] با استفاده از روش شبه پتانسیل و بسط توابع موج الکترونهای ظرفیت براساس امواج تخت حل می گردند. برای کاهش حجم محاسبات تعدادی از نقاط شبکه را به عنوان نمایندهٔ تمام نقاط در فضای وارون انتخاب میکنیم [۱۰]. بهمنظور بهینهسازی تعداد نقاط شبکه با تعیین مبنای همگرایی (eV) ۰٫۰۱ به انجام محاسبات خودسازگار پرداخته و تغييرات انرژى بهازاى مقادير مختلف نقاط شبكه محاسبه شده است [٧]. پس از انجام بهینهسازی های لازم تعداد نقاط شبکه ۲×۱۲×۱۲ بهدست آمده است. انرژی قطع برای این محاسبات ۷۰ ریدبرگ در نظر گرفته شده است. ثابت شبکه بهینه شده برای ترکیبهای AgBr و AgI بهترتیب برابر با ۰٫۸۹ آنگستروم و ۲٫۲۰ آنگستروم با استفاده از معادلهٔ مورناگون برای فاز نمک سنگی تعیین شده است [۱۱]. شکل ۱ ساختار بهینه را برای ترکیبهای AgBr و AgI نشان میدهد.

برای محاسبه ثابتهای کشسانی، ما از همان شیوهای استفاده کردیم که توسط بریچ و چارپین توصیف شده است [۱۳ و ۱۲]. برای ساختارهای کریستال مکعبی تعداد ثابتهای الاستیک مستقل تنها به سه ثابت الاستیک، یعنی  $C_{11}$ ،  $C_{12}$  و  $C_{44}$  کاهش می یابد بنابراین تعیین این ثابتها مستلزم مجموعهای از سه معادله است [12]. اولین معادلهای که مدول حجمی  $B_0$  را به ثابتهای کشسانی مرتبط می کند بهقرار زیر است [۱۲،۱۵]:

$$B_0 = \frac{1}{2} \left( C_{11} + 2C_{12} \right) \tag{1}$$



شکل ۱: نمایی از ساختار بهینهٔ انبوههٔ نقره برمید و نقره یدید.

# نتایج و بحث پارامترهای الاستیک و ثبات مکانیکی

برای مطالعه خواص نوری مواد و قطعات، یکی از پارامترهای مهم ثابتهای الاستیسیته مواد در فاز نمک سنگی در فشار صفر است. مقادیر محاسبه شده از ثابتهای کشسانی  $C_{11}$ ،  $C_{12}$  و  $C_{44}$ با استفاده از تقریب GGA در جدول ۱ گزارش شده است. با استفاده از نتایج ثابتهای الاستیک در کار کنونی و با توجه به معادلهٔ ۱، مدول حجمی برای ترکیبهای AgBr و AgB بهترتیب ۲۸٬۳۰ و ۲۲٬۳۰ گیگا پاسکال تخمین زده شده است. برای اینکه یک ترکیب در یک فاز بلوری باثبات باقی بماند، ثابتهای الاستیک آن باید مجموعهای از شرایطی را که معیارهای پایداری مکانیکی آن را تشکیل میدهند، برآورده کنند. این معیارهای پایداری در فشار صفر در فاز نمک سنگی به شرح زیر است [۱۰ و

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}} \tag{(Y)}$$



يا بيشتر از واحد نشانگر درجه ناهمسانگردی الاستيک است. مطابق با نتایج جدول ۲، هر دو ترکیب دارای ویژگی ناهمسانگردی هستند. نسبت پواسون یک پارامتر مهم برای برآورد انعطاف پذیری مواد و همچنین نشان دهنده میزان جهت گیری پیوند کووالانسی است. وجه تمایز بین یک ماده شکننده یا انعطافپذیر با مقدار بحرانی نسبت پواسون که ۳۳٬۰ بیان می شود، که ترکیبات انعطاف-پذیر معمولاً نسبت پواسون بیشتر از ۳۳، را دارا میباشند. بنابراین، بر اساس مقادیر محاسبه و ارائه شده در جدول ۲، می توان نتیجه گرفت که ترکیبهای AgBr و AgI شکلپذیر هستند. همچنین سختی یک ماده میتواند با استفاده از مدول برشی همسانگرد بهتر از مدول حجمی پیش بینی شود. مقدار بالاتر G در ترکیب AgI در مقایسه با ترکیب AgBr بیانگر این امر است که AgI از سختی بیشتری نسبت به AgBr برخوردار است. علاوهبراین، مقادیر بالای مدول برشی همسانگرد ماهیت پیوند کووالانسی در مواد را نشان میدهد. سختی و شدت پیوندهای کووالانسی در یک ماده با مدول یانگ ارتباط مستقیم دارد [۱۹]. همانطور که در جدول ۲ نشان داده شده است ، مقدار ۲ محاسبه شده برای ترکیب AgI بالاتر از ترکیب AgBr است. این بدان معنی است که ترکیب AgI از ترکیب AgBr سختی بیشتری دارد. روش دیگر برای تخمین شکل پذیری مواد نسبت مدول حجمی به مدول برشی همسانگرد  $B_0/$ است [۲۰]. مقدار بحرانی این نسبت که مواد انعطاف پذیر را از مواد شکننده متمایز میکند، ۱٬۷۵ است. اگر مقدار این نسبت بیشتر از ۱٬۷۵ باشد، ماده رفتار انعطاف پذیر دارد، در حالی که برای مقادیر کمتر از ۱٫۷۵، دلیلی بر شکننده بودن مواد است. مقدار بالاتر در ترکیب AgBr در مقایسه با ترکیب  $\operatorname{AgBr}_{\mathcal{A}}$  نشان میدهد که  $B_0/_{\mathcal{A}}$ AgBr انعطاف پذیر بیشتری نسبت به AgI دارد. معیار دیگری که به رفتار شکننده یا شکلپذیر مواد اشاره دارد فشار کوشی است که با رابطهٔ  $C_{12} - C_{44}$  بیان می شود [۲۱]. آن دسته از ترکیبات که دارای مقادیر مثبت فشار کوشی هستند شکل پذیر هستند، در حالی که مقادیر منفی فشار کوشی بیانگر ماهیت شکنندهٔ ترکیبات است [۲۲]. فشارهای کوشی محاسبه شده برای ترکیبهای AgBr و AgI بهترتیب ۲۵٬۷۷ و ۱۹٬۰۱ است. در تایید نتایج نسبت AgI

$$\mathcal{G} = \frac{3B_0 - 2G}{6B_0 - 2G} \tag{(1)}$$

$$G = \frac{G_R + G_V}{2} \tag{6}$$

$$y = \frac{9GB_0}{G+3B_0} \tag{7}$$

*G* مدول برشی وویگت است مربوط به مرز بالایی از مقادیر *G* و *G* مدول برشی ریسو است که مربوط به محدوده پایینی *G* است. آنها می توانند با روابط زیر بیان شوند:

$$G_V = \frac{C_{11} - C_{12} + 3C_{44}}{5} \tag{V}$$

$$\frac{5}{G_R} = \frac{4}{C_{11} - C_{12}} + \frac{3}{C_{44}} \tag{(A)}$$

ثابتهای کشسانی	تركيبات		
(GPa)	AgBr	AgI	
<i>C</i> <sub>11</sub>	٥٩٫٣٨	٤٨٫٤٦	
<i>C</i> <sub>12</sub>	٤٦,٦٢	٣٧,٩٨	
$C_{44}$	• /• ٢	٥٫٩٠	
$B_0$	0 • ,AV	٤١,٤٧	

جدول (۲): مقایسه فاکتور ناهمسانگردی زینر A، نسبت پواسون g، مدول برشی همسانگرد (۲): مقایسه فاکتور ناهمسانگرد  $B_0 / \int_G C_{12} - C_{44}$  و فشار کوشی AgBr و AgBr و AgBr ترکیبهای

1 1.1	تركيبات			
پارامترها	AgBr	AgI		
А	• , ٩١	١,•١		
9	• ،٤١	۰٫۳۸		
G(GPa)	٤,٦٨	٦,٣٣		
Y(GPa)	۲۰,۷۱	۲٥٫٧٣		
$B_0/G$	٨/١٢	٥,٤٦		
$C_{12} - C_{44}$	۲٥٫٧٧	19/+1		

اندازهگیری فاکتور ناهمسانگردی زینر A درجه ناهمسانگردی را در ساختار جامدات نشان میدهد و مقدار کوچکی از آن بیانگر این است که این مواد کاملاً ناهمسانگرد هستند. برای بلورهای ایزوتروپیک 1=A تعریف شده است، در حالی که مقادیر کوچکتر



[1Y] F. Birch, "The effect of pressure upon the elastic parameters of isotropic solids, according to Murnaghan's theory of finite strain." *Journal of Applied Physics* 9, No. 4 (1938) 279-288.

[17] E. Schrieber, O. L. Anderson, and N. Soga. "Elastic Constants and Their Measurement.", (1973) 747-748.

[1<sup>1</sup>] A. Gueddim, N. Fakroun, N. Bouarissa, and A. Villesuzanne, Mater.Chem. Phys. **118**, (2009) 427-431.

[1°] Z. Zhou, and B. Joós. "Stability criteria for homogeneously stressed materials and the calculation of elastic constants." *Phys. Rev. B* **54**, No. 6 (1996) 3841-3850.

[<sup>1</sup>] F. Milstein, and R. Hill. "Divergences among the born and classical stability criteria for cubic crystals under hydrostatic loading." *Phys. Rev. Lett* 43, No. 19 (1979) 1411-1413.

[1Y] B. Mayer, H. Anton, E. Bott, M. Methfessel, J. Sticht, J. Harris, and P. C. Schmidt, *Intermetallics* **11**, No. 1 (2003) 23-32.

[<sup>\A</sup>] A. Aliakbari, P. Amiri " Structural, elastic, electronic, thermal, and phononic properties of yttrium carbide: First-principles calculations ." *Materials Chemistry and Physics* **270**, (2021) 124744.

[14] C. Jenkins, and S. Khanna, "Mechanics of materials: a modern integration of mechanics and materials in structural design." *Academic Press*, (2005) 62-72.

 $[\gamma \cdot]$  A. Moussali, M.B. Amina, B. Fassi, I. Ameri, M. Ameri, and Y. Al-Douri, "First-principles calculations to investigate structural and thermodynamic properties of Ni2LaZ (Z= As, Sb, and Bi) Heusler alloys." *Indian Journal of Physics* **94**, (2020) 1733-1747.

[<sup>Y</sup>] S. Ganeshan, S. L. Shang, H. Zhang, Y. Wang, M. Mantina, and Z. K. Liu. "Elastic constants of binary Mg compounds from first-principles calculations." *Intermetallics* **17**, No. 5 (2009) 313-318.

[YY] D. G. Pettifor, "Theoretical predictions of structure and related properties of intermetallics." *Materials science and technology* **8**, No. 4, (1992) 345-349.

مقادیر بهدست آمده فشار کوشی شکلپذیری بیشتر ترکیب AgBr را نسبت به ترکیب AgI نشان میدهد.

## نتيجه گيرى

در این مقاله پایداری مکانیکی و خواص کشسانی انبوههٔ هالوژنهای نقره (X=Br and I) در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی توسط بستهٔ محاسباتی کوانتوم اسپرسو با تقریب شیب تعمیم یافته انجام گرفته است. فاکتور ناهمسانگردی هستند. در میدهد هر دو ترکیب دارای ویژگی ناهمسانگردی هستند. در توافق با مدول برشی همسانگرد، نتایج بدست آمده از مدول یانگ نشان میدهد که ترکیب AgI نسبت به AgBr از سختی بیشتری برخوردار است. از سوی دیگر، نسبت پواسون نشان داده است که ترکیب AgBr انعطاف پذیری بیشتری نسبت به AgI دارد و شکل پذیرتر است. همچنین نتایج فشار کوشی با نسبت پواسون مطابقت خیلی خوبی دارد.

مرجعها

[1] S. Glaus, and G. Calzaferri, Photochem., "The band structures of the silver halides AgF, AgCl, and AgBr: A comparative study." *Photochemical & Photobiological Sciences* **2**, No. 4 (2003) 398-401.

[Y] J. E. Enderby and A. C. Barnes, "Liquid semiconductors." *Reports on Progress in Physics* **53**, No. 2 (1990) 85.

[<sup>r</sup>] I. Ebbsjo, P. Vashishta, R. Dejus, and K. Skold, "Inelastic neutron scattering and dynamics of ions in the super-ionic conductor Ag2S." *Journal of Physics C: Solid State Physics* 20, No. 21 (1987) L441.
 [<sup>\*</sup>] C.M.I. Okoye, "Full-Potential Study of the Electronic Structure of

Silver Halides." physica status solidi (b) 234, No. 2 (2002) 580-589.

[4] L.A.Palomino-Rojas, "Density functional study of the structural properties of silver halides: LDA vs GGA calculations." *Solid state sciences* 10, No. 9 (2008) 1228-1235.

[1] T. Seddik, R. Khenata, A. Bouhemadou, N. Guechi, A. Sayede, D. Varshney, Y. Al-Douri, A. H. Reshak, S. Bin-Omran "External temperature and pressure effects on thermodynamic properties and mechanical stability of yttrium chalcogenides YX (X=S, Se and Te)" *Physica B* **428**, (2013) 78–88.

[Y] P.behzadi, S.A.Ketabi, " Optical properties of silver halids: Density Functional Theory procedure" *Physics* **98**, (2019) 545.

[<sup>A</sup>] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof. "Generalized gradient approximation made simple." *Phys. Rev. Lett* **77**, No. 18 (1996) 3865-3568.

[<sup>4</sup>] P. Hohenberg, and W. Kohn, "Inhomogeneous Electron Gas," *Phys. Rev. B* 136, No.3 (1964) 864-871.

[1.] H. J. Monkhorst, J. D. Pack, "Special point for Brillouin-zone integrations", *Phys. Rev. B* 13, No. 12 (1976) 5188-5192.

[11] F. D. Murnaghan, "The compressibility of media under extreme pressures." *Proceedings of the national academy of sciences of the United States of America* **30**, No. 9 (1944) 244-247.



## فهرست ثبتنام كنندكان

۱. مینا آسیابی ۳. سارا آق تومان ۵. فاطمه ابراهیمی ۷. حامد احمدی ترکمانی ۹. سمیه استکی ۱۱. اسما اسکندرلی ۱۳. على الخيگاني ۱۵. مجيد اميرزاده ۱۷. فاطمه ایران نژاد ۱۹. محمدرضا باسعادت ۲۱. الميرا برزه کار ۲۳. فاطمه بوالخيري ۲۵. علی بیجاری ۲۷. فاطمه يشتيبان اصل ۲۹. مهدی ترکاشوند ۳۱. حميدرضا تقيلو ۳۳. محمدمهدی جامعی ۳۵. مرجانه جعفری فشارکی ۳۷. مینا جولایی فروشانی ۳۹. زهرا حاجی احمدی ۴۱. مهدی حسن پور ۴۳. سید وحید حسینی ۴۵. تهمینه خادمی ۴۷. اکبر خلج ۴۹. محمدخندابی ۵۱. سارا خیامی ۵۳. رضا دهرابی ۵۵. داود راعیانی

۲. حامد أغاجري ۴. مونا آقاجانی مرسار ۶. زهرا ابراهیمی پور ۸. مبينا اردياني حسين اسحاقيان ۱۲. نیکان افصح<u>ی</u> ۱۴. عسل امیرخانی ۱۶. محمدامینی ۱۸. فاطمه ایزدی ۲۰. زینب بخشی پور ۲۲. علی بنی اسدی ۲۴. فاطمه بوربور ۲۶. مصطفی پرندین ۲۸. ابوالفضل پورهاشمی ۳۰. مهراب تسليح ۳۲. حديث ثلاثي ۳۴. علیرضا جعفری پور ۳۶. فاطمه جلالی ۳۸. علی چوپانی ۴۰. آرش حبیبی ۴۲. شراره حسن پور کاشانی ۴۴. کائنات حمیدی ۴۶. فاطمه خادمیان ۴۸. مریم خلیل وند ۵۰. جواد خوش پيام ۵۲. جمال داوودی ۵۴. هديه ذولعلي

۵۶. پوریا ربیع بیگی





حميدرحيم پور	۵۷.
سیما رحیمی	۵۹.
زينب رشيديان	۶۱ ا
محمدرنجبر تكليمي	.98
محدثه زنگنه	۶۵.
پگاه سرتیپی زاده	.97
سعد سلطانی	.99
فاطمه سليمانى	.۷۱
سید امیر سلیمی ارشد	۳۷.
خسروسياوشي اراتبني	۵۷.
فاطمه شريعتي نيا	.77
محبوبه شهرى ناصرى	.٧٩
محمد مهدی شکری	۱ ۸.
مجيد شيردل هاور	۸۳.
مرتضي صالحي	۵۸.
محمدصندوقچى	۸۷.
سعید عابدی	۸۹.
ريحانه عبدي	۹۱.
حامد عرب نصرت أبادى	۹۳.
مجتبى عطايى	۹۵.
مهدى غلام پور	۹۷.
مهرنوش فخرالدين	.٩٩
.سحر فرزین صدر	۱۰۱
.امير فواديان	۱۰۳
.میثاق قمری	۱۰۵
.حدیث گروهی	۱۰۷
.عبدالله لنگرى	۱۰۹
.میلاد مالکی مقدم	۱۱۱
رویا مجیدی	۱۱۳
.فاطمه محرمی نژاد	۱۱۵
.رضا محمدزاده	۱۱۷
فاطمه محمديان بهنامي.	۱۱۹
فاطمه محموديان.	۱۲۱
.سید مهدی مستور	۱۲۳
.آرزو معاذالهي	170
.عرفانەمقدسى نژاد	177
.مهدی ملایی	129
.سندس موالی زاده	۱۳۱
.مسلم میر	۱۳۳

۵۸. محمدرضا رحیمی
۶۰. زهرا رحیمی
۶۲. فاطمه رضائی
۶۴. ریحانه زمانی
۶۶. شیرین سبک دست
۶۸. نادیا سلامی
۷۰. حامد سلطانی
۷۲. سحر سلیمانی فر
۷۴. نوید سیاه کمری
۷۶. جمیله سیدیزدی
۷۸. ساناز شهبازی
۸۰. رویا شکرانی حویق
۸۲. مهدی شکوری
۸۴. محمدرضا صادقی فر
۸۶. منصوره صديقي عطار
۸۸. سحر ضیاالملکی
۹۰. طیبه عباسی
۹۲. فاطمه عرب بیگی
۹۴. مژگان عسگری
۹۶. الميرا عنابي ميلاني
۹۸. سیاوش فتحی
۱۰۰.زینب فرد علیدادی
۱۰۲.فرزاد فرهمندزاده
۱۰۴.ریحانه قائمی نژاد
۱۰۶.سمانەقنبرى كاشان
۱۰۸.مازیار گودرزی
۱۱۰.مريم مالمير
۱۱۲.سحر متقيان
۱۱۴.مسعود مجيديان سرمزده
۱۱۶.علی محمدپور
۱۱۸.محمدرضا محمدی زاده
۱۲۰.مهدیه محمودی
۱۲۲.مهرداد مرادی
۱۲۴.فاطمه مظهری موسوی
۱۲۶.احسان مقدسی بیات
۱۲۸.الهام ملاحسینی
۱۳۰.منصور مهدوی
۱۳۲.زهرا موسيوند
۱۳۴.فاطمه ميرمجربيان



## مقالهنامه شانزدهمین کنفرانس ماده چگال انجمن فیزیک ایران (دانشگاه شهید بهشتی، ۵ و ۶ بهمن ماه ۱۴۰۱)



- ۱۳۶.ریحان نجاتی پور ۱۳۵.شيرين نامجو ۱۳۷.محمدکاظم نگهداری ۱۳۸.میلاد نوروزی ۱۴۰.کامیاب هادیفر ۱۳۹.مهران نوری ۱۴۱.مهدی هاشمی ۱۴۲.مریم هاشمی ۱۴۴.پوريا هژبر ۱۴۳.سیدجواد هاشمی فر ۱۴۵.امیرحسین وثوقی ۱۴۸.فاطمه کرمی ۱۴۷.زهرا کرم بیگی ۱۵۰.رضا کلامی ۱۴۹.علی کرمی ۱۵۲.بشری کیانی صدر ۱۵۱.زهرا کی احمدی ۱۵۴.فلورا يوسفى ۱۵۳.مقداد یزدانی حمید
- ۱۴۶.آسیه السادات کاظمی شیخ شبانی