مقاله نامه

کنفرانس فیزیک ایران

۱۴۰۱

دانشگاه سیستان و بلوچستان

۱۴ تا ۱۶ شهریور ۱۴۰۱

PROCEEDINGS

Of the

Annual Physics Conference of Iran

Sistan and Baluchestan University
5-8 September 2022

انجمن فیزیک ایران

دانشگاه سیستان و بلوچستان

کنفرانس فیزیک ایران

Annual Physics Conference of Iran

Sistan & Baluchestan University 5-8 September 2022

دانشگاه سیستان و بلوچستان

زاهدان – ۱۴ تا ۱۷ شهریور ۱۴۰۱

کمیته علمی

کیوان آقابابایی‌سامانی (دانشگاه صنعتی اصفهان) دبیرکمیته
علیرضا آقائی (دانشگاه سیستان و بلوچستان)
فاطمه ابراهیمی (دانشگاه بیرجند)
سهراب احمدی‌کندجانی (دانشگاه تبریز)
حسین حکیمی‌پژوه (دانشگاه الزهرا)
فاطمه حیدری‌نسب (دانشگاه سیستان و بلوچستان)
نیما خسروی (دانشگاه شهیدبهشتی)
عبدالمحمود داورپناه (دانشگاه سیستان و بلوچستان)
مهدی رادین (دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی)
جلال سرآبادانی (پژوهشگاه دانش‌های بنیادی)
شهریار سلیمی (دانشگاه کردستان)
سروش شاکری (دانشگاه صنعتی اصفهان)
یاسر عبدی (دانشگاه تهران)
انسیه عرفانی (دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان)
یاشار عزیزیان (دانشگاه محقق اردبیلی)
محمد علی‌عسگریان (دانشگاه اصفهان)
احمد قدسی‌محمودزاده (دانشگاه فردوسی مشهد)
ایرج کاظمی‌نژاد (دانشگاه شهید چمران اهواز)
عبدالله لنگری (دانشگاه صنعتی شریف)
حمید مصدق (دانشگاه شهرکرد)
سامان مقیمی‌عراقی (دانشگاه صنعتی شریف)
علی مهدی‌فر (دانشگاه اصفهان)
حمید نادگران (دانشگاه شیراز)

کمیته اجرایی

علیرضا آقائی (دبیرکمیته)
هادی اسماعیلی
مجتبی اشهدی
عصمت حشمت‌نژاد
فاطمه حیدری‌نسب
ساره دادفر
وحید دهقانی
مجید رشیدی‌هویه
سوده زارع‌پور
صلاح‌الدین زرین
محسن سعادت
دانیال سعادتمند
ذبیهاب صحبت‌زاده
مرتضی عودی
الهام فرحبخش
محمدرضا محمدی
علی‌اکبر مهماندوست‌خواجه‌داد
ناصر هاتفی‌کرگان

برای کسب اطلاعات بیشتر، ثبت‌نام و ارسال مقاله به این نشانی مراجعه کنید:

http://www.psi.ir/f/physics1401

آخرین مهلت دریافت مقاله:
۱۵ اردیبهشت ۱۴۰۱
آخرین مهلت ثبت‌نام:
۱۰ مرداد ۱۴۰۱



This conference is held as part of the celebrations of the International Year of Basic Sciences for Sustainable Development 2022

با حمایت:

نشانی کمیته‌ی علمی:
تهران، خیابان کارگر شمالی، روبروی خیابان نوزدهم، دانشکده‌ی فیزیک دانشگاه تهران، ساختمان خیام، طبقه‌ی همکف، اتاق G06، انجمن فیزیک ایران
تلفن: ۸۸۲۲۵۶۹۳-۰۲۱ دورنگار: ۶۶۹۰۵۲۴۷-۰۲۱

نشانی کمیته‌ی اجرایی:
زاهدان، خیابان دانشگاه، دانشگاه سیستان و بلوچستان، دانشکده‌ی علوم، گروه فیزیک
تلفن: ۳۱۱۳۶۳۳۷-۰۵۴. دورنگار: ۳۳۴۴۶۵۶۵-۰۵۴
همراه دبیر اجرایی: ۰۹۱۵۳۷۸۰۱۸۹

در هم تنیدگی و گذار فاز کوانتومی در هسته‌ها

جعفریزاده، محمد علی[1]

1 دانشگاه تبریز ، دانشکده فیزیک ، گروه نظری

چکیده

یکی از جالب ترین ویژگی های نظریه کوانتومی، درهم تنیدگی کوانتومی است. درهم تنیدگی کوانتومی یک پدیده فیزیکی است که زمانی اتفاق می‌افتد که گروهی از ذرات برهم کنش می‌کنند، یا مجاورت فضایی مشترک دارند، به طوری که حالت کوانتومی هر ذره از گروه را نمی‌توان مستقل از حالت ذرات دیگر توصیف کرد. اخیراً، انتقال فاز کوانتومی در سیستم های هسته ای از طریق درهم تنیدگی کوانتومی مورد مطالعه قرار گرفته است. برای مشخص کردن خصوصیات سیستم بایستی یک پارامتر نظم معرفی شود. درهم تنیدگی کوانتومی را می توان به عنوان یکی از کاندیداهای اصلی برای پارامتر نظم در سیستم های هسته ای در نظر گرفت. این ارائه بر روی استفاده از آنتروپی درهم تنیدگی به عنوان یک سیگنال مناسب برای مطالعه انتقال فاز کوانتومی در هسته‌های زوج به زوج و فرد A متمرکز شده است. ما جزئیات آنتروپی درهم تنیدگی را در مدل‌های هسته‌ای جبری از جمله مدل‌های اندرکنش های بوزونی (IBM، IBM2)، مدل‌های اندرکنش بوزون- فرمیونی (IBFM، IBFM2) ، مدل خوشه ای آلفا و مدل پوسته‌ای بررسی می‌کنیم. نتایج نشان می دهد که آنتروپی درهم تنیدگی یک ابزاری قوی برای شناسایی انتقال فازی شکلی در هسته است.

Entanglement and quantum phase transition in nuclei

Jafarizadeh, Mohammad ali[1]

[1] Tabriz University, Faculty of Physics, Theoretical Group

Abstract

One of the most interesting features of quantum theory is quantum entanglement. Quantum entanglement is a physical phenomenon that occurs when a group of particles interact, or share spatial proximity such that the quantum state of each particle of the group cannot be described independent of the state of the others. Recently, quantum phase transition in nuclear systems is studied via quantum entanglement. An order parameter has to be introduced for characterizing the properties of the system. Quantum entanglement can be considered as one of main candidates for the order parameter in nuclear systems. This presentation is focused on utilizing the entanglement entropy as a suitable signal for the study of quantum phase transition in the even-even and odd-A nuclei. We explore in detail the entanglement entropy in the algebraic nuclear models including interacting boson models (IBM, IBM2), the interacting boson fermion models (IBFM, IBFM2), Alpha cluster model and Shell model. The results indicate that entanglement entropy is a potent tool for identifying shape phase transitions in nuclei.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

نوسانات عصبی، انتقال اطلاعات و کارکردهای مغز

ولی‌زاده، علیرضا[۱،۲]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، گاوازنگ، زنجان

[۲] موسسه رهیافت‌های نوآور برتر پاسارگاد، تهران

چکیده

در این سخنرانی در مورد نقش نوسانات جمعی شبکه‌های مغزی در کارکردهای پایه و فعالیت‌های شناختی مغز صحبت میکنم. بر این پایه استدلال خواهم کرد که چرا تغییرات غیرعادی در طیف نوسانات مغز، برابر آنچه که تحقیقات چند دهه‌ی اخیر نشان داده‌اند، نشانه بروز ناهنجاری‌های شناختی یا بیماری‌های مغزی است. در سالهای اخیر تحقیقات بسیاری نقش نوسانات مغزی را در تبادل اطلاعات بین نورون‌ها و نواحی مغز بررسی کرده‌اند. نشان داده شده است که نوسانات مغزی میتوانند مبنای سازوکاری باشند که تبادل اطلاعات را بین نواحی مغزی کنترل میکند و میتوانند الگوهای تبادل اطلاعات را به شکل پویا تعیین کنند. همچنین، کارکرد درست مغز وابسته به وجود درجه‌ی معینی از همزمانی بین سلول‌های عصبی است به گونه‌ای که همزمانی بین نورون‌ها و به تبع آن دامنه نوسانات جمعی، وابسته به زمان و حالت مغز در بازه مشخصی تغییر میکند که در افراد و گونه‌های مختلف الگوی مشابهی را نشان میدهند. نتایج آزمایشگاهی و الگوهای مکانی-زمانی نوسانات تایید میکنند که دینامیک نورون‌ها در شبکه‌های مغزی در حالتی مابین حالت همزمان کامل و ناهمزمانی هستند که برای کارکرد درست مغز لازم است.

Neural oscillations, information transfer and normal brain function

Alireza Valizadeh[1,2]

[1] *Department of Physics, Indstitute for Advanced Studies in Basic Sciences (IASBS), Gavazang, Zanjan*
2 Pasragad Institute for Advanced Innovative Solutions (PIAIS), Tehran

Abstract

In this talk, I will discuss how the collective oscillations of neural networks contribute in the basic and high-level brain functions and why the abnormal spectrum of the brain rhythms are associated with different neurological and cognitive disorders--as the experimental observations show. In the recent years the role of the brain oscillations in the communication between the neurons and the neuronal ensembles have been highlighted. It is shown that brain oscillations can control the amount of information that is shared and transferred between the brain regions and in this way they can dynamically change pattern of the communication in the brain. Moreover, there is an intermediate and time-dependent degree of the synchrony between the neuronal activities in the nervous system which leads to a dynamic pattern of brain oscillations, that is specific for the brain state and consistent across trials, subjects, and even across species. I will argue that such spatiotemporal pattern of the oscillations in the nervous system is an indicator of a state near the transition between synchrony and asynchrony which has been proved to be essential for the healthy brain functions.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

فیزیک لیزر میدان قوی؛ مفاهیم، تکنیک‌ها و کاربردها

توسط: محمد صبائیان
دانشیار فیزیک اپتیک و لیزر
گروه فیزیک و مرکز تحقیقات لیزر و پلاسما
دانشگاه شهید چمران اهواز

در اوایل دهۀ ۱۹۹۰ میلادی، ترکیب تکنیک چرپ‌کردن پالس با لیزرهای پهن باندی مثل تیتانیوم سافایر، باعث رشد چشم‌گیری در تولید پالس‌های فوق کوتاه و پر شدت شد. اکنون پس از گذشت نزدیک به سی سال، لیزرهایی ساخته شده‌اند که می‌توانند پالس‌هایی فوق کوتاه با انرژی پتاوات ($1PW=10^{15}$ W) در آزمایشگاه‌های کوچک و تنها بر روی چند میز اپتیکی، تولید کنند. بکارگیری تکنیک تقویت پالس چرپ‌شده (CPA) در لیزرهای حالت جامد، که اولین بار توسط مورو و همکارنش مورد استفاده قرار گرفت، امکان تولید پالس‌های لیزری پرشدت چند چرخه‌ای (few cycle) با شدت‌هایی از مرتبۀ 10^{13} W/cm^2 تا 10^{23} W/cm^2 را فراهم کرده است. امروزه، تقریباً تمام سامانه‌های لیزری تولید پالس‌های فوق سریع با توان قله‌ای پالس بسیار بالا، از تکنیک CPA همراه با فشرده سازی پالس استفاده می‌کنند. "پالس‌های لیزری میدان قوی" که عموماً طول پالسی کمتر از ۱۰۰ fs و انرژی‌ای در حد میلی‌ژول تا چند ژول دارند، کاربردهای فوق‌العاده‌ای نظیر همجوشی هسته‌ای، شتابدهی یون‌های سنگین و الکترون‌ها، تولید جهت الکترون‌ـــــپوزیترون از طریق برهم‌کنش فوتون با پالس لیزری، تولید هماهنگ‌های مرتبۀ بالا، تولید پالس‌های آتوثانیه، تولید لیزرهای X-ray، تولید پلاسماهای نسبیتی، تست‌های الکترودینامیک کوانتومی، تولید پرتوهای گامای پر انرژی و چشمه‌های نوترونی، تولید حالت‌های گربۀ شرودینگر، تولید تابش‌های پرانرژی تراهرتزی و ... دارند.

در این سخنرانی، ابتدا به بررسی سامانه‌های تولید پالس‌های لیزری فوق کوتاه پر شدت فمتوثانیه‌ای در تکنیک CPA پرداخته می شود. سپس به برهم‌کنش پالس پر شدت با اتم در مدل سه مرحله‌ای پرداخته می‌شود. به ویژه، چگونگی تولید هماهنگ‌های مرتبۀ بالا و پالس آتوثانیه (1 as=10^{-18} s) مورد بررسی قرار می‌گیرد. در ادامه، چیدمان‌های معروف برای مطالعۀ برهم‌کنش‌های پالس پر شدت با ماده، تولید و اندازه‌گیری پالس‌های آتوثانیه در منطقۀ XUV/VUV معرفی می شود. پس از آن، کاربردهای حال حاضر و پیش‌بینی شدۀ پالس‌های پر شدت فمتوثانیه و آتوثانیه معرفی می شوند. در نهایت، تلاش‌های انجام شده در مرکز تحقیقات لیزر و پلاسمای دانشگاه شهید چمران اهواز و سایر آزمایشگاه‌های کشور در مدل سازی فرایندهای برهم‌کنس میدان قوی با اتم و نیز فعالیت‌های تجربی نظیر ساخت لیزرهای فوق پرشدت و راه‌اندازی چیدمان‌های آزمایشگاهی برای مطالعۀ فیزیک لیزر میدان قوی معرفی می‌شود.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

Ultra-high repetition-rate lasers: A new horizon in laser micromanaging and microsurgery

Elahi, Parviz

[1] *Department of Physics, Boğaziçi University, Istanbul, Turkey*

Abstract

Ultrafast fiber lasers, which deliver picosecond or sub-picosecond pulses, have been numerously adopted in industry and medicine. They are perfect tools in precise and low damage zone micromachining and microsurgery. Unlike the high-power, continuous wave (CW) lasers, ultrafast lasers can cut or drill different materials with minimal heat damage to the surrounding material.

Using ultra-high repetition-rate pulses at the GHz level brings a new regime of laser-matter interaction called the "ablation-cooled" regime [1-3]. In this regime, the laser pulses are sent so quickly that the heat generated from the laser is ejected away with the ablated material, keeping the rest of the target material cool. Employing ultra-high repetition-rate lasers involves increasing ablation efficiency by more than ten times, reducing the required laser pulse energies by 1000 times, and achieving record speeds in cutting biological tissue, metals, and semiconductors.

In this talk, after a review of ultrafast fiber lasers, the potential of ultra-high repetition-rate fiber lasers in the future of industry and science, especially in high-speed and high-efficient micromachining and microsurgery, will be discussed.

References

[1] Kerse, C., Kalaycıoğlu, H., Elahi, P., Çetin, B., Kesim, D. K., Akçaalan, Ö., ... & Ilday, F. Ö. (2016). Ablation-cooled material removal with ultrafast bursts of pulses. *Nature*, *537*(7618), 84-88.

[2] Kalaycıoğlu, H., Elahi, P., Akçaalan, Ö., & Ilday, F. Ö. (2017). High-repetition-rate ultrafast fiber lasers for material processing. *IEEE Journal of selected topics in quantum electronics*, *24*(3), 1-12.

[3] Elahi, P., Akçaalan, Ö., Ertek, C., Eken, K., Ilday, F. Ö., & Kalaycoğlu, H. (2018). High-power Yb-based all-fiber laser delivering 300 fs pulses for high-speed ablation-cooled material removal. *Optics Letters*, *43*(3), 535-538.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تلسکوپ فضایی جیمز وب، چشمانی نو بر روی کیهان

آیرین شیوایی

چکیده

چکیده تلسکوپ فضایی جیمز وب، که در دی ماه سال ۱۴۰۰ با موفقیت به فضا پرتاب شد، بزرگترین تلسکوپی است که بشر تاکنون در فضا قرار داده است. جیمز وب با آینه‌ای به قطر ۶/۵ متر جایگزین تلسکوپ هابل و اسپیتزر است. وب در طول‌موج‌های فروسرخ نزدیک و میانه رصد می‌کند و چهار ابزار قدرتمند تصویربرداری و طیف‌سنجی دارد که با آن‌ها نخستین کهکشان‌های عالم، ستاره‌های تازه‌متولدشده و سیارات فراخورشیدی را رصد و کشف می‌کند. در این سخنرانی، درباره تاریخچه این تلسکوپ فضایی، قابلیت‌هایش و برنامه‌های علمی آن صحبت خواهم کرد.

Title: James Webb Space Telescope: A New Window to Our Universe

Abstract: James Webb Space Telescope, launched in December 2021, is the largest telescope we have sent to space. With a 6.5 meter mirror, it is the predecessor of Hubble and Spitzer space telescopes. Webb observes the Universe in near- and mid-infrared wavelengths with its four powerful imaging and spectroscopic instruments. Its main science themes are studying the early Universe, galaxies over time, lifecycle of stars, and exoplanets. In this talk, I will review the history of the telescope, its capabilities, and its main science goals.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

Status of the Concordance Model of Cosmology

Shafilu, Arman

Abstract

I review the status of the standard model of cosmology in light of recent observations discussing current tensions and some different alternatives including some early and late universe solutions to the problem. I will also briefly discuss the future of the field at the era of the next generation of astronomical/cosmological surveys.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

Ion transport through angstrom scale channels for Highly efficient energy storage and harvesting

Ali Esfandiyar[1]

[1] *Faculty of Physics, Sharif University of Technology, Tehran*

Abstract

Transport of fluids through two-dimensional channels with thicknesses less than a few nanometers scales, which imposes a great physical confinement on fluid molecules, has caused emerging properties. Due to this fact, these channels, which are made based on two-dimensional materials, are considered a very suitable option for new generation membranes to control the flow of fluid and ions in recent years. Reverse electrodialysis-based membranes are one of the most promising approaches to osmotic energy production. However, conventional reverse electrodialysis membranes have high strength and insufficient mass transfer, which leads to low power density and efficiency. In recent decades, the transport of ions at the nanoscale for the manufacture of reverse electrodialysis machines has attracted much attention. Compared to conventional devices, power density and energy conversion efficiency increase dramatically due to space constraints and electrostatic interactions at the nanoscale. Lamellar nanostructures, which can be easily fabricated by stacking two-dimensional nanosheets, may be a promising and scalable alternative to efficient membranes with phenomena such as fast water transport and high ion selectivity. MXene nanosheets with high mechanical strength and stability in aqueous environments are suitable for creating transmembrane nanochannels. MXene colloidal solution also has liquid crystal property, and its sheets can be adjusted in a specific direction by applying shear. The alignment of the nanosheets in the membrane significantly reduces the membrane's resistance and results in the super-fast transport of water molecules and ions through the membrane. But to date, due to some technical problems such as lack of scalability and difficult coagulation of MXene in the coagulation bath, the use of additive-free MXene fiber as a membrane has not been successful. In this study, we introduce two-dimensional nanoscale channels that can be used in the study of nanofluids and the production of osmotic energy by changing the surface charge density of MXene nanosheets and fabricating MXene fibers by wet spinning. Improving the spinning conditions of MXene fibers leads to a denser structure and reduces the height of nanochannels, thereby increasing ion selectivity. Also, the surface charge density of nanochannels leads to the formation of an electric double layer in the channel and greater selectivity of ions due to electrostatic interactions. High ion selectivity of MXene fibers with opposite charges can increase the power of electro-dialysis cells made in river water gradient (0.01 M sodium chloride) and seawater (0.5 M sodium chloride) to 12.3 W/m^2, which is very More than commercialization power (5 W/m^2), as record of generated power to date by membranes. In addition, by arrays of 10 cells and making a reverse electro-dialysis machine, we achieved a voltage of 1.7 V, which can directly process a large number of electronic devices. High scalability and stability suggest MXene fiber-based membranes as a suitable alternative to clean and sustainable energy production.

Keywords: *MXene, Membrane, Ion transport, Two-dimensional channels, Nanofluidics, Ion conduction, Osmotic energy conversion*

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

چکیده

ترابرد سیالات از درون کانال های دو بعدی با ضخامت های کمتر از چند نانومتر که محدودیت فیزیکی زیادی بر مولکول های سیال اعمال می کند موجب بروز خواص نوظهوری شده است. به همین دلیل این کانال ها که از مواد دوبعدی ساخته می شوند در سال های اخیر گزینه بسیار مناسبی برای غشاهای نسل جدید جهت کنترل جریان سیال و یون ها به حساب می آیند. غشاهای بر پایه‌ی الکترودیالیز معکوس، یکی از نویدبخش‌ترین رویکردها برای تولید انرژی اسمزی هستند؛ با این‌حال غشاهای تجاری مرسوم الکترودیالیز معکوس، مقاومت زیاد و انتقال جرم ناکافی دارند که منجر به پایین بودن چگالی توان و بازده آن‌ها می‌شود. در دهه‌های اخیر ترابرد یون در مقیاس نانو برای ساخت دستگاه‌های الکترودیالیز معکوس توجه زیادی را به خود جلب کرده‌است. در مقایسه با دستگاه‌های متداول، چگالی توان و بازدهی تبدیل انرژی به علت محدودیت فضایی و برهم‌کنش‌های الکترواستاتیکی در مقیاس نانو افزایش چشمگیری پیدا می‌کند. نانوساختارهای لایه‌ای، که می‌توانند به آسانی با روی هم قرار دادن نانوصفحات دو بعدی ساخته شوند، ممکن است جایگزین امیدوارکننده و مقیاس‌پذیری برای غشاهای کارآمد با پدیده‌هایی مانند انتقال سریع آب وانتخاب پذیری یونی بالا باشد. نانو صفحات مکزین با استحکام مکانیکی بالا و پایداری در محیط های آبی گزینه‌ی مناسبی برای ایجاد نانوکانال غشایی است. همچنین محلول کلوئیدی مکزین دارای خاصیت بلور مایع است و می‌توان با اعمال نیروی برشی ورقه‌های آن را در جهت خاصی، هم جهت کرد. هم جهت بودن نانوصفحات در غشا باعث کاهش چشمگیر مقاومت غشا و در نتیجه ترابرد فوق سریع مولکول‌های آب و یون‌ها از درون آن می‌شود. اما تاکنون به دلیل برخی مشکلات فنی مانند عدم مقیاس‌پذیری و انعقاد دشوار مکزین در حمام انعقاد، استفاده از فیبرهای بدون افزودنی مکزین به عنوان غشا با موفقیت همراه نبوده‌است. در این پژوهش، ما با تغییر چگالی بار سطحی نانوصفحات مکزین و ساخت الیاف مکزین به روش ریسندگی مرطوب، کانال‌هایی دوبعدی در مقیاس نانو معرفی می‌کنیم که می‌توان از آن‌ها در مطالعه‌ی نانوسیالات و تولید انرژی اسمزی بهره برد. بهبود شرایط ریسندگی فیبرهای مکزین منجر به ساختار متراکم‌تر و کاهش ارتفاع نانوکانال‌ها می‌شود و به‌تبع آن گزینش پذیری یونی افزایش می‌یابد. همچنین چگالی بار سطحی نانوکانال‌ها منجر به ایجاد لایه‌ی دوگانه الکتریکی در کانال و انتخاب پذیری بیش‌تر یون‌ها به علت برهم‌کنش‌های الکترواستاتیکی می‌شود. گزینش پذیری یونی بالای فیبرهای مکزین با بارهای مخالف، می‌تواند توان سلول الکترودیالیز ساخته شده در گرادیان آب رودخانه (۰٫۰۱ مولار سدیم کلرید) و آب دریا (۰٫۵ مولار سدیم کلرید) را به ۱۲٫۳ وات بر مترمربع برساند که بسیار بیش‌تر از توان تجاری‌سازی (۵ وات بر مترمربع) و توان بیش‌تر غشاهای ساخته شده تا به امروز است. همچنین با سری کردن ۱۰ سلول و ساخت دستگاه الکترودیالیز معکوس به ولتاژ ۱٫۷ ولت می‌رسیم که می‌تواند به صورت مستقیم تعداد زیادی از وسایل الکترونیکی را روشن کند. مقیاس‌پذیری و پایداری بالا، غشاها بر پایه‌ی فیبر مکزین را به‌عنوان جایگزینی مناسب برای تولید انرژی پاک و پایدار پیشنهاد می‌کند.

کلمات کلیدی: مکزین، غشا، ترابرد یون، کانال‌های دوبعدی، نانوسیال، رسانش یونی، تبدیل انرژی اسمزی

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

اثر تیرگی فوتون در توزیع حرارتی لیزرهای فیبری ایتربیومی

کریمی، مریم [۱]

[۱] پژوهشکده فوتونیک و فن‌آوری کوانتمی، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی، انتهای خیابان کارگر شمالی، تهران

چکیده

عوامل حرارتی و اثرات غیرخطی می‌توانند خروجی لیزرهای فیبری را تحت تاثیر قرار داده و آن را کاهش دهد. در این مقاله اثر تیرگی فوتون به عنوان عامل مجزا در معادلات نرخ اعمال شده است. با توجه به نتایج گزارش‌های تجربی، تغییرات تلفات ناشی از تیرگی فوتون به عنوان یک تابع نمایی کشیده پیشنهاد شده است. همچنین سهم عوامل مختلف در تولید گرما در لیزر فیبری ایتربیومی با مشخصات معلوم شبیه‌سازی و معین شده است.

واژه های کلیدی: *تیرگی فوتون، اثرات حرارتی، لیزر فیبری آلاییده به ایتربیوم، توزیع حرارتی.*

Photo-darkening Effect on Heat Distribution of Yb Doped Fiber Lasers

Karimi, Maryam[1]

[1] *Photonic and Quantum Technology Research School, Institute of Nuclear Science and Technology, AEOI, Tehran, Iran*

Abstract

Abstract: Several effects, such as thermal effects and optical nonlinear can change and reduce the output power of high-power fiber laser. In this paper photo-darkening effect is inserted in the rate equations. Concerning experimental results, photo-darkening loss is proposed as a stretched exponential function. Also, the share of the different agents in heat distribution at the ytterbium fiber lasers with the known characteristics has been simulated and determined.

***Keywords**: Photodarkening Effect, Thermal Effects, Ytterbium Doped Fiber laser, Heat Distribution.*

PACS No: ٤٤

مقدمه

لیزرهای فیبری ایتربیومی توان بالا در ناحیه نزدیک به یک میکرون عمل می‌کنند. وجود توان بالا در این لیزرها منجر به بروز اثرات غیرخطی نوری مانند اثر رامان، بریلوئن و مدولاسیون خود فاز یا فاز متقابل می‌شود. توان بالا همچنین منجر به بروز اثرات حرارتی در این نوع لیزرها می‌شود که از عوامل مزاحم در این نوع لیزرها بوده و باعث کاهش توان و کیفیت پرتو خروجی می‌شود با بروز عواملی مانند ناپایداری مدی در لیزرهای فیبری می‌شود. یکی از عوامل تولید گرما وجود نقص کوانتمی[1] در این نوع لیزرها است.

گرمای ناشی نقص کوانتومی از اختلاف انرژی بین فوتون‌های دمش و سیگنال ناشی می‌شود [۱]. تیرگی فوتون[2] منبع گرمایی دیگر گرمازا است که به طول موج دمش و سیگنال، اندازه مغزی فیبر و غیره بستگی دارد [۱]. تیرگی فوتون که به آن آسیب فتوکرومیک[3] یا جذب القایی فوتون[4] نیز می‌گویند، زمانی رخ می‌دهد که پرتو نوری در طول موج‌های خاص تابش می‌شود [۲]. تیرگی فوتون در لیزرهای فیبری ایتربیومی برای دمش در ناحیه طول‌موجی ۹۱۶-۹۷۵ نانومتر و یا ناحیه مرئی ٤٨٨ نانومتر پدیدار

[1] Quantum defect: QD

[2] Photo-darkening: PD
[3] Photochromic damage
[4] Photo-induced absorption

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

می‌شود. پدیده تیرگی فوتون باعث انتقال و افزایش تلفات زمینه از ناحیه فرابنفش به ناحیه فروسرخ می‌شود [۳]. افزایش دمای محیط ناشی از این پدیده باعث تغییر ضریب‌شکست فیبر شده و در نتیجه ساختار موجبری فیبر را تغییر می‌دهد. در نتیجه تلفات خمشی برای مدهای مختلف فیبر را تغییر می‌یابد [٤]. بار حرارتی ناشی از پدیده تیرگی فوتون باعث تغییر فاز پرتو، ایجاد توری ضریب شکست و در نهایت منجر به ناپایداری مدی[5] در لیزرهای پرتوان فیبر آلاییده به ایتربیوم می‌شود [٤]. هنوز توضیح فیزیکی کاملی برای مکانیزم پدیده تیرگی فوتون بیان نشده است. با این حال محققان تلاش زیادی در راستای کاهش این پدیده می‌کنند. اثر تیرگی فوتون با بزرگ کردن اندازه مغزی (ناحیه مدی بزرگ[6]) تا حد زیادی رفع می‌شود. با این حال در این نوع فیبرها هنوز جذب القایی فوتون دیده می‌شود. این جذب در ناحیه مرئی و فرو سرخ نزدیک، ناشی از مراکز رنگ[7] در شیشه رخ می‌دهد [۵]. مراکز رنگی دارای باند جذب از فرابنفش تا ناحیه مرئی هستند. دلایل مختلفی در خصوص توصیف ایجاد مراکز رنگی پیشنهاد شده است [٦]. برخی ناخالصی‌ها با غلظت بالا مانند آلومنیوم می‌تواند پدیده تیرگی فوتون را سرکوب کند [٤]. بهینه‌سازی آلاینده‌های ترکیبی با یون‌های Ce، P، Al و Na در لیزر فیبری می‌تواند تاحدی این پدیده را مهار کند.

در تحقیقات قبل، تعاریف مختلف برای منابع تولید گرما در لیزرهای فیبری ارائه، شبیه سازی و با هم مقایسه شدند [۷]. در این مقاله، پدیده تیرگی فوتون به‌عنوان عامل کاهش توان در معادلات نرخ اضافه شد و تاثیر این پدیده در توزیع دمایی لیزر فیبری آلاییده به ایتربیوم مورد بررسی قرار گرفته است.

معادلات نرخ با درنظر گرفتن اثر تیرگی فوتون

در مرجع [۳۸]، نتایج تجربی پدیده تیرگی فوتون در طول موج ٦۳۳ نانومتر و غلظت‌های مختلف آلاینده ارائه شده است. در این مرجع نشان داده شده است که با افزایش توان پمپ، این تلفات افزایش یافته و در توان پمپ تقریبی ٤ مگا وات، مقدار تلفات به یک عدد ثابت نزدیک می‌شود، به‌طوری که می‌توان یک تابع نمایی را بر روی این نتایج برازش کرد. در این مقاله تابع نمایی کشیده[8] $\alpha_{PD-\lambda}(I_\lambda)=A\left(1-\exp(-\varepsilon I_\lambda)\right)$ برای تغییرات تلفات تیرگی فوتون برحسب توان ورودی پیشنهاد می‌شود. در این عبارت $\alpha_{PD-\lambda}$ تلفات در یک طول موج خاص، λ و I_λ به‌ترتیب طول موج پرتو و توان ورودی، ε و A مقادیر ثابت حقیقی و مثبت هستند. با توجه به عدم وجود نتایج تجربی برای طول موج‌های مختلف برای این پدیده، مقادیر ثابت این معادله برای همه طول‌موج‌ها یکسان درنظر گرفته می‌شود. معادلات نرخ در لیزر فیبری به‌صورت زیر بیان می‌شود:

$$\pm\frac{dP_\ell^\pm(z)}{dz}=\Gamma_\ell\left[\left(\sigma_\ell^e+\sigma_\ell^a\right)N_2(z)-\sigma_\ell^a N\right]P_\ell^\pm(z)-\alpha_\ell P_\ell^\pm(z) \qquad (۱)$$

$$\pm\frac{dP_p^\pm(z)}{dz}=-\Gamma_p\left[\sigma_p^a N-\left(\sigma_p^e+\sigma_p^a\right)N_2(z)\right]P_p^\pm(z)-\alpha_p P_p^\pm(z) \qquad (۲)$$

$$\frac{N_2(z)}{N}=\frac{\frac{\left[P_p^+(z)+P_p^-(z)\right]\sigma_p^a\Gamma_p}{h\upsilon_p A_{co}}+\frac{\left[P_\ell^+(z)+P_\ell^-(z)\right]\sigma_\ell^a\Gamma_\ell}{h\upsilon_\ell A_{co}}}{\frac{\left[P_p^+(z)+P_p^-(z)\right]\left(\sigma_p^a+\sigma_p^e\right)\Gamma_p}{h\upsilon_p A_{co}}+\frac{1}{\tau}+\frac{\left[P_\ell^+(z)+P_\ell^-(z)\right]\left(\sigma_\ell^a+\sigma_\ell^e\right)\Gamma_\ell}{h\upsilon_\ell A_{co}}} \qquad (۳)$$

در عبارت فوق $P_p^\pm$، و $P_\ell^\pm$ به‌ترتیب توان دمش و لیزر (+ پیشرو، – پس‌رو)، υ_p و υ_ℓ، به‌ترتیب فرکانس دمش و لیزر، σ_ℓ^e، σ_ℓ^a، σ_p^a به‌ترتیب سطح مقطع‌های گسیل و جذب در طولموج لیزر و جذب در طولموج دمش هستند. H ثابت پلانک، و τ طول عمر تراز پایدار، N *چگالی ایتربیوم بر حسب* $\mathrm{ion/m^3}$، z موقعیت مکانی در لیزر فیبری، Γ_p و Γ_ℓ ضریب هم‌پوشانی در طول‌موج‌های دمش و لیزر هستند. که به ترتیب برابر $\Gamma_p\approx A_{co}/A_{cl1}$ و $\Gamma_\ell=1-\exp\left(-2r_{co}^2/\omega^2\right)$ است. r_{co}، شعاع مغزی، ω، سایز نقطه‌ای است. α_p و α_ℓ تلفات زمینه در طول‌موج‌های دمش و لیزر، α_{PD-p} و $\alpha_{PD-\ell}$ تلفات ناشی از تیرگی فوتون در طول‌موج‌های دمش و لیزر هستند که با رابطه زیر بیان می‌شوند [۸]:

$$\alpha_{PD^{633nm}}(dB/m)\approx 175\left(\frac{N}{8.74\times10^{25}}\right)^{2.09}\cdot\frac{N_2/N}{0.46};$$

$$\alpha_{PD^{1\mu m}}(dB/m)\approx 175\left(\frac{N}{AFF\times8.74\times10^{25}}\right)^{2.09}\cdot\frac{N_2/N}{0.46}\cdot\frac{AFF}{\gamma}; \qquad (٤)$$

$$\gamma=24.5;\quad PD^{633}=\frac{PD^{1\mu m}}{\left(\frac{dB}{}\right)};$$

AFF، کسر پرشدگی و $\alpha_{PD-\ell}\approx\alpha_{PD-p}\approx\alpha_{PD^{1\mu m}}$ در نظر گرفته شده است. تغییرات توان دمش را می‌توان به‌صورت ساده زیر بیان کرد:

5 Mode instability: MI
6 Large-mode-area: LMA fibers
7 Color centers
8 Stretched exponential function

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$$\frac{dP_p(z)}{dz} = -\frac{Ah\nu_p}{\phi_p \tau} N_2(z) \qquad (۵)$$

که در آن $\phi_p \sim 1$ است. با ترکیب معادلات (۱) و (٦) و انتگرال گیری از آن تغییرات توان دمش بصورت زیر خواهد بود:

$$\ln\frac{P_p^{\pm}(z)}{P_p^{\pm}(0)} + \frac{\phi_p \tau}{Ah\nu_p}\left[\left(\sigma_p^e + \sigma_p^a\right) - \frac{\ln 10}{10}\frac{C}{N}\right]\left(P_p^{\pm}(z) - P_p^{\pm}(0)\right) + \left(\sigma_p^a N \Gamma_p + \alpha_p\right) z = 0 \qquad (٦)$$

$$C = 175 \cdot \left(\frac{N}{AFF \times 8.74 \times 10^{25}}\right)^{2.09} \cdot \frac{AFF}{0.46\gamma}$$

معادلات توزیع گرما در تقویت‌کننده و لیزرهای فیبری

معادلات توزیع گرما در ناحیه مغزی و غلاف‌ها با در نظر گرفتن مختصات استوانه‌ای به‌صورت زیر خواهد بود [۹]:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial T_{core}(r,z)}{\partial r}\right) = -\frac{Q(z)}{K_1}, \qquad (0 \le r \le a) \qquad (۷)$$

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial T_{clads}(r,z)}{\partial r}\right) = 0, \qquad (a \le r \le c) \qquad (۸)$$

در عبارت فوق، $Q(r,z)$، چگالی گرما بر واحد حجم $(\mathrm{W/m^3})$ است و خواهیم داشت [۱۰]:

$$Q_T(z) = Q_{QD}(z) + Q_{PD}^P(z) + Q_{PD}^{\ell}(z) + Q_{PL}^p(z) + Q_{PL}^{\ell}(z) \qquad (۹)$$

$$Q_{PL-i}(z) = \frac{\alpha_i}{A_m^i}\left(P_i^+(z) + P_i^-(z)\right);\ i = (s,p) \qquad (۱۰)$$

A_m^i : mode area of the light (Pump or signal)

α_i : Propagation of loss due to absorption and not scattering

$$Q_{PD}^i(z) = \frac{\Gamma_i Ln(10) PD^{1\mu m}}{10A_{co}}\left(P_i^+(z) + P_i^-(z)\right); \qquad (۱۱)$$

$$Q_{QD}(z) = (1-S)\frac{\Gamma_p\left(\sigma_p^a N_1(z) - \sigma_p^e N_2(z)\right)\left(P_p^+(z) + P_p^-(z)\right)}{A_{co}}; \qquad (۱۲)$$

در عبارات فوق T_{clad} ،T_{core} به‌ترتیب دما در ناحیه مغزی و غلاف، بهره کوانتمی $S = \lambda_p/\lambda_\ell$، Q_{QD}، Q_{PD}^P، Q_{PD}^{ℓ}، Q_{PL}^p، و Q_{PL}^{ℓ}، به‌ترتیب گرما تولید شده ناشی از نقص کوانتمی، تلفات انتشار در طول موج دمش و لیزر، و تیرگی فوتون در طول موج دمش، و طول‌موج لیزر است. با اعمال شرایط مرزی تغییرات دمایی به شکل زیر خواهد بود:

$$dT_{core}(r=0,z)/dr = 0 \ \rightarrow T_{core}(r=0,z) = cte, \qquad (۱۳)$$

$$T_{core}(a,z) = T_{clad1}(a,z),\ K_1\frac{dT_{core}(r=a,z)}{dr} = K_2\frac{dT_{clad1}(r=a,z)}{dr}, \qquad (۱٤)$$

$$T_{clad1}(b,z) = T_{clad2}(b,z),\ K_2\frac{dT_{clad1}(r=b,z)}{dr} = K_3\frac{dT_{clad2}(r=b,z)}{dr}, \qquad (۱۵)$$

$$\frac{dT_{clad2}(r=c,z)}{dr} = \frac{h}{K_h}\left(T_c(r,z) - T_{clad2}(r=c,z)\right) + \frac{\sigma_b \varepsilon}{K_h}\left(T^4{}_c(r,z) - T^4{}_{clad2}(r=c,z)\right), \qquad (۱٦)$$

K_1، K_2، K_3 ضرایب انتقال حرارتی رسانایی و σb ضریب استفان بولتزمن است. بنابراین دما در ناحیه مغزی و غلاف اول و دوم به‌صورت زیر خواهد بود:

$$T_{core}(r,z) = T_0(z) - \frac{Q(z)r^2}{4K_1} \qquad (0 \le r \le a), \qquad (۱۷)$$

$$T_{clad1}(r,z) = -\frac{Q(z)a^2}{K_2}\ln r + Q(z)a^2 \ln b\left(\frac{1}{k_2} - \frac{1}{k_3}\right) + T_{clad2}(r=c,z) + \frac{Q(z)a^2}{K_3}\ln c \qquad (a \le r \le b), \qquad (۱۸)$$

$$T_{clad2}(r,z) = -\frac{Q(z)a^2}{K_3}\ln r + \frac{Q(z)a^2}{K_3}\ln c + T_{clad2}(r=c,z) \ \ (b \le r \le c), \qquad (۱۹)$$

نتایج شبیه سازی

در جدول (۱) مقادیر مورد نیاز برای شبیه سازی ارائه شده است. با فرض دمش دوسویه در لیزر و جایگزینی پارامترها و حل عددی معادلات تغییرات گرمای تولید شده در لیزر فیبری حاصل می‌شود.

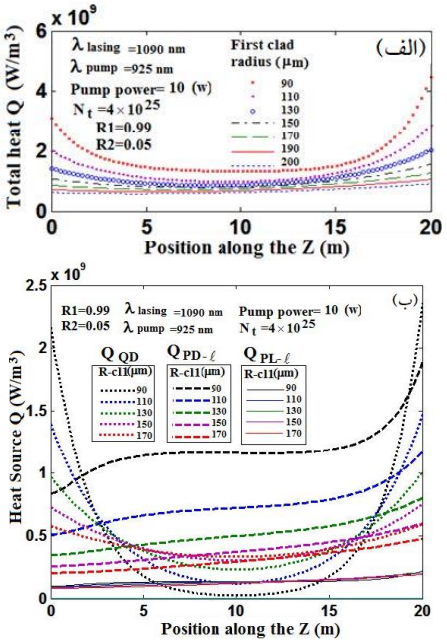
جدول (۱): مقادیر ثابت در شبیه‌سازی

Parameters	Values (unit)
Emissivity	ε =0.85
Stefan-Boltzmann constant	σ_b=5.67×10^{-8} W/(m^2·K^4)
Ambient temperature	T_c = 290 K
Core conductive heat transfer coefficient	K_1 =1.38
First clad conductive heat transfer coefficient	K_2 =1.38
Second clad conductive heat transfer coefficient	K_3 =0.2
Air conductive heat transfer coefficients	K_h =0.025 $Wm^{-1}K^{-1}$
Convective heat transfer coefficient	h=100 $Wm^{-2}K^{-1}$
laser wavelength (λ_s)	λ_s=1090 nm
laser absorption cross-section [17]	σ_s^a=1.23×10^{-28} m^2
laser emission cross-section [17]	σ_s^e=1.24×10^{-25} m^2
Signal background loss	α_S=5 dB/km
Pump wavelength	λ_p= 925 nm
Pump absorption cross-section [17]	σ_p^a=6.64×10^{-25} m^2
Pump emission cross-section [17]	σ_p^e=4×10^{-26} m^2
Input pump power, FWP, BDP	P_p=500, 250 mW
Input pump power, BWP, BDP	P_p=500, 250 mW
Pump background loss [17]	α_P=3 dB/km
power filling factor	0.0025
Steady-state lifetime	T=0.84 s
dopant concentration	N_t=4×10^{25} ion/m^3
Active fiber length	L=20 m
Front Bragg reflector	R$_1$=0.98 at 1090 nm
back Bragg reflector	R$_2$=0.4 at 1090 nm

در شکل (۱ الف)، تغییرات گرمای کل تولید شده در لیزر فیبری بر حسب موقعیت مکانی برای مقادیر مختلف اندازه غلاف اول ترسم

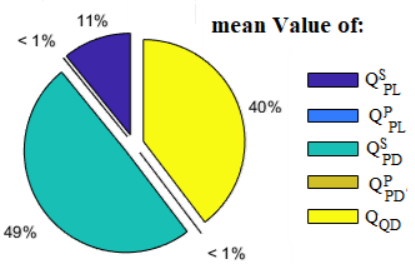
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

شده است. همان‌طور که از شکل مشاهده می‌شور با بزرگتر شدن شعاع غلاف اول از ۹۰ به ۲۰۰ میکرون، میزان گرمای تولید شده در فیبر بخصوص در نواحی دمش فیبر کاهش می‌یابد. بنابراین لیزرهای فیبری با غلاف بزرگتر احتمال آسیب و سوختن دو انتهای فیبر کمتر می‌شود. شکل (۱-ب)، سهم عوامل مختلف شامل Q_{PD}^{ℓ}، Q_{PL}^{ℓ}، و QD را در تولید حرارت در لیزر فیبری نشان می‌دهد. تغییرات Q_{PD}^{ℓ} با افزایش اندازه مغزی قابل توجه و چشم‌گیر است.



شکل (۱): الف-گرمای کل تولید شده در لیزر فیبری، ب- سهم عوامل مختلف تولید گرما بر حسب موقعیت مکانی برای مقادیر مختلف اندازه غلاف اول در لیزر فیبری.

شکل (۲)، نمایانگر سهم عوامل مختلف تولید گرما در FL است.



شکل (۲): سهم عوامل مختلف گرما زا در ایجاد حرارت در لیزر فیبری.

در ترسیم شکل (۲)، برای عوامل مختلف گرما زا در لیزر فیبری ،متوسط گیری نسبت به طول فیبر انجام شده است. برای مقادیر داده ارائه شده در جدول (۱)، تیرگی فوتون در طول‌موج لیزر عامل اصلی تولید گرما در لیزر فیبری است و نقص کوانتمی عامل دوم گرمازا است. عوامل تیرگی فوتون و تلفات انتشار در طول‌موج دمش ناچیز و قابل صرف‌نظر کردن است.

نتیجه گیری

در این مقاله عامل تیرگی فوتون به شکل تابع نمایی کشیده به معادلات نرخ اضافه شد. نتایج شبیه سازی نشان می‌دهد در نواحی دمش در فیبر بیشترین حرارت تولید می‌شود بنابراین احتمال آسیب در این نواحی بیشتر است. سهم تولید گرما با عوامل تیرگی فوتون و تلفات انتشار در طول موج دمش ناچیز و قابل صرف نظر است. با متوسط گرمای تولید شده در طول فیبر نشان می‌دهد که عامل تیرگی فوتون در طول‌موج لیزر و نقص کوانتمی بیشترین عامل تولید گرما در لیزر فیبر ایتربیومی است. تغییر پارامترهای فیبر سهم عوامل مختلف گرمازا در لیزر فیبری را تغییر می‌دهد.

مرجع‌ها

[1] A. V. Smith, and J. J. Smith, “Mode instability thresholds for Tm-doped fiber amplifiers pumped at 790 nm”, Opt. express. Vol. 24, (2016) 975-992.
[2] C. Ye, L. Petit, J. J. Koponen, I-N. Hu, and A. Galvanauskas, “Short-Term and Long-Term Stability in Ytterbium-Doped High-Power Fiber Lasers and Amplifiers”, ieee. j. sel. top. quantum. electron., 20, (2014) 0903512.
[3] R. Cao, X. Lin, Y. Chen, Y. Cheng, Y. Wang, Y. Xing, H. Li, L. Yang, G. Chen, and J. Li, “532 nm pump induced photo-darkening inhibition and photo-bleaching in high power Yb-doped fiber amplifiers”, Opt. Express, 27, (2019), 26523-26531.
[4] R. Cao, G. Chen, Y. Chen, Z. Zhang, X. Lin, B. Dai, L. Yang, AND J. Li, “Effective suppression of the photodarkening effect in high-power Yb-doped fiber amplifiers by H2 loading”, Photonics Research, Vol. 8, pp. (2020), 288-295.
[5] R. Peretti, C. Gonnet, A. Marie Jurdyc, “A new vision of photodarkening in yb3+-doped fibers”, Optical Components and Materials IX, Proc. of SPIE, 8257, (2012), 825705.
[6] R. Peretti, C. Gonnet, and A. Marie Jurdyc, “Revisiting literature observations on photodarkening in Yb3+doped fiber considering the possible presence of Tm impurities”, App. Phys., 112, (2012), 093511.
[7] M. Karimi, “Theoretical Study of the Thermal Distribution in Yb-Doped Double-Clad Fiber Laser by Considering Different Heat Sources”, Progress in Electromagnetics Research C, 88, (2018) 59–76.
[8] C. Jauregui, H. J. Otto, F. Stutzki, J. Limpert, and A. Tünnermann1, “Simplified modelling the mode instability threshold of high-power fiber amplifiers in the presence of photodarkening”, Opt. Express., 23, (2015) 20203- 20218.
[9] P. Yan, X. Wang, Y. Huang, C. Fu, J. Sun, Q. Xiao, D. Li, and M. Gong, “Fiber core mode leakage induced by refractive index variation in high-power fiber laser”, Chin. Phys. B, 26, (2017) 034205.
[10] M. Karimi, “Heat Distribution in High Power Yb Doped Fiber Laser by Considering Photo-darkening Effect” Accepted in AUT J. modeling & Simulation.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

ایجاد سریع برهم نهی همدوس حالتها در سیستم‌های N - پایه با روش میان‌بر بر گذار بی دررو بر پایه ناوردایی لوییس_رزنفلد

محمدی ، مریم[۱] ؛ سعادتی نیاری، مقصود[۲] ؛ سعیدیان ، شاهپور[۱]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، صندوق پستی ۶۶۷۳۱-۴۵۱۳۷، زنجان، ایران

[۲] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه محقق اردبیلی، صندوق پستی ۱۷۹ ، اردبیل، ایران

چکیده

ایجاد سریع برهم‌نهی همدوس حالت‌ها در سیستم‌های N-پایه با استفاده از روش میان‌بر بر گذار بی‌دررو و بر پایه ناوردایی لوئیس-رزنفلد مطالعه شده است. نشان داده شده است که با طراحی مناسب پالس‌ها جمعیت به صورت سریع و موثر از تک تراز زمینه اول به یک برهم‌نهی دلخواه از ترازهای زمینه دیگر بدون نیاز به پالس اضافی منتقل می‌شود. برای طراحی پالس‌ها از دو نوع شرایط مرزی استفاده شده است. درحالت اول، در حین تحول زمانی تراز تحریکی جمعیت‌دار نمی‌شود ولی در حالت دوم، در حین تحول زمانی تراز تحریکی جمعیت‌دار می‌شود.

واژه های کلیدی: *انتقال جمعیت، تکنیک میان‌بر بر گذار بی‌دررو، ناوردایی لوییس-رزنفلد.*

Creation of fast superposition of states in N -pod systems using shortcut to adiabatic passage based on Lewis-Rosenfeld invariance

Mohamadi, Maryam[1]; Saadati Niari, Maghsoud[2] ; Saeidian, Shahpoor[1]

[1] Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences (IASBS), Zanjan, Iran
[2] Department of Physics, Faculty of Sciences, University of Mohaghegh Ardabili, P.O. Box 179, Ardabil, Iran

Abstract

Creation of fast superposition of states in N -pod systems using shortcut to adiabatic passage based on Lewis-Rosenfeld invariance has been investigated. It has been shown that with proper pulse design, the population is rapidly and effectively transferred from the initial single ground state to an arbitrary superposition of other ground states without the need for additional pulses. Two types of boundary conditions have been used to design the pulses. In the first case, the excited state does not become populated during the time evolution, but in the second case, the excited state becomes populated.

***Keywords**: Population transfer, Shortcut in adiabatic passage method, Lewis-Rosenfeld invariant*

PACS No.32

مقدمه

انتقال جمعیت و برهم‌نهی همدوس حالت‌ها در اندرکنش لیزر با اتم در دهه اخیر مورد توجه بوده است. برای انتقال جمعیت، از روش‌های مختلفی همانند روش تنظیم مساحت پالس [۱] و روش گذار بی‌دررو تحریکی رامان [۲] استفاده می‌شود. گذار بی‌دررو تحریکی رامان ابتدا در سیستم سه ترازی Λ-گونه به کارگرفته شده و با استفاده از دو پالس لیزری پمپ و استوکس جمعیت از یک تراز زمینه به تراز زمینه دیگر بدون جمعیت‌دار شدن تراز تحریکی منتقل می‌شود. این روش نسبت به نوسانات پارامترهای مختلف (شدت میدان و تاخیر زمانی پالس‌ها) غیرحساس بوده ولی از آنجایی‌که اساس آن، قضیه بی‌دررو است، تحول زمانی سیستم تدریجی و زمان‌بر می‌باشد. انتقال تدریجی جمعیت در حالتی که طول عمر تراز تحریکی بسیار پایین و یا زمان اندرکنش بیشتر از زمان همدوسی لیزر باشد، منجر به تخریب دینامیک همدوس تحولی سیستم می‌شود.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

در سالهای اخیر روشهای مختلفی برای انتقال سریع جمعیت بر پایه روش گذار بی دررو در سیستمهای دو ترازی و سه ترازی پیشنهاد شده است که روشهای میانبر بر گذار بی دررو نامیده می‌شوند [۳-٤]. همچنین در مراجع [٥-٦] روشهای میانبر بر گذار بی دررو در سیستمهای پیچیده‌تر کوانتومی به کار گرفته شده است. در یکی از این روش‌ها، برای انتقال جمعیت در سیستم سه ترازی، علاوه بر پالس‌های پمپ و استوکس، پالس دیگری برای جفت‌شدگی حالت‌های زمینه استفاده شده است [۳]. این پالس برای انتقال سریع و موثر از تراز زمینه اول به تراز زمینه دوم استفاده می‌شود. مشکل این روش عدم امکان استفاده آن در سیستم‌هایی که گذار از تراز یک به سه ممنوع است، می‌باشد. در مرجع [٤] روشی برای انتقال جمعیت در سیستم‌های سه ترازی برپایه اصل ناوردایی لوئیس-رزنفلد [۷] پیشنهاد شده است که از دو پالس لیزری برای انتقال جمعیت در سیستم سه ترازی استفاده شده و مشکلات مرجع [۳] وجود ندارد.

در این مقاله روش پیشنهاد شده در مرجع [٤] برای اولین بار برای ایجاد برهم نهی سریع حالتها در سیستم N-پایه به کار گرفته شده است. نشان می‌دهیم که با طراحی مناسب پالسها، می‌توان جمعیت را به صورت سریع از یک تراز منفرد اولیه به برهم نهی همدوس از سایر حالتها با استفاده از روش میانبر بر گذار بی دررو منتقل کرد.

انتقال جمعیت در سیستم‌های سه‌ترازی با استفاده از اصل ناوردایی لوییس-رزنفلد

الگوی جفت شدگی اتم با لیزر در یک سیستم سه ترازی Λ-گونه را مطابق شکل ۱ در نظر می‌گیریم. هامیلتونی چنین سیستمی در تقریب موج چرخان از رابطه زیر به دست می‌آید:

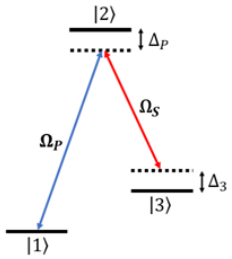
$$H_0(t)=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & \Omega_P(t) & 0\\ \Omega_P(t) & 2\Delta_P & \Omega_S(t)\\ 0 & \Omega_S(t) & 2\Delta_3\end{pmatrix}, \qquad (۱)$$

که Ω_P و Ω_S فرکانس پمپ و استوکس و $\Delta_3=\Delta_S-\Delta_P$ است (در اینجا $\Delta_P=\Delta_S=0$). طبق ناوردایی لوئیس-رزنفلد عملگر $I(t)$ را طوری طراحی می‌کنیم که در رابطه زیر صدق کند.

$$\frac{dI(t)}{dt}=\frac{\partial I(t)}{\partial t}+\left(\frac{1}{i\hbar}\right)[I(t),H(t)]=0. \qquad (۲)$$

در حالت کلی $H(t)$ با $I(t)$ جابه جا نمی‌شود اما در گذار شبه آدیاباتیک در $t=0$ و $t=t_f$ این شرط برآورده می‌شود. $I(t)$ را برحسب پارامترهای جدید β، γ و Ω_0 به صورت زیر می‌نویسیم.

$$I(t)=\frac{\hbar}{2}\Omega_0\begin{pmatrix}0 & \cos\gamma\sin\beta & -i\sin\gamma\\ \cos\gamma\sin\beta & 0 & \cos\gamma\cos\beta\\ i\sin\gamma & \cos\gamma\cos\beta & 0\end{pmatrix}, \qquad (۳)$$



شکل ۱: الگوی جفت شدگی یک سیستم سه ترازی Λ-گونه.

برای Ω_S و Ω_P بر حسب پارامترهای β، γ خواهیم داشت:

$$\Omega_S(t)=2\left(\dot\beta\cot\gamma\cos\beta-\dot\gamma\sin\beta\right), \qquad (٤\text{-الف})$$

$$\Omega_P(t)=2\left(\dot\beta\cot\gamma\sin\beta+\dot\gamma\cos\beta\right). \qquad (٤\text{-ب})$$

در ابتدای تحول زمانی، می‌خواهیم سیستم در حالت اولیه $|1\rangle$ قرار داشته باشد و در انتهای تحول زمانی، جمعیت به تراز $|3\rangle$ منتقل شود. برای طراحی پالسهای لیزری دو نوع شرایط مرزی را در نظر می‌گیریم.

حالت اول:

برای حالت اول شرایط مرزی را به صورت زیر می‌نویسیم:

$$\gamma(0)=0, \qquad \beta(0)=0, \qquad (٥\text{-الف})$$

$$\gamma(t_f)=0, \qquad \beta(t_f)=\frac{\pi}{2}. \qquad (٥\text{-ب})$$

با در نظر گرفتن شرایط مرزی در $t=0$ و شرط $\Omega_P(0)=0$، داریم $\dot\gamma(0)=0$. همین‌طور با توجه به $\Omega_S(t_f)=0$، خواهیم داشت $\dot\gamma(t_f)=0$. با بی‌نهایت شدن $\cot\gamma$ در $\gamma=0$، شرایط مرزی را بازنویسی می‌کنیم که در آن $0<\varepsilon<1$ است:

$$\gamma(t)=\varepsilon, \qquad \beta(t)=\frac{\pi t}{2t_f}. \qquad (٦)$$

با جایگذاری در روابط (٤-الف) و (٤-ب) خواهیم داشت:

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$$\Omega_S(t)=(\frac{\pi}{t_f})\cot\varepsilon\cos(\frac{\pi t}{2t_f}), \qquad (۷\text{-الف})$$

$$\Omega_P(t)=(\frac{\pi}{t_f})\cot\varepsilon\sin(\frac{\pi t}{2t_f}). \qquad (۷\text{-ب})$$

حالت دوم:

برای حالت دوم، شرایط مرزی را به صورت زیر در نظر می‌گیریم.

$$\gamma(0)=\varepsilon, \qquad \beta(0)=0, \qquad (۸\text{-الف})$$

$$\gamma(t_f)=\varepsilon, \qquad \beta(t_f)=\frac{\pi}{2}, \qquad (۸\text{-ب})$$

$$\dot\gamma(0)=0, \qquad \dot\beta(0)=0, \qquad (۸\text{-ج})$$

$$\dot\gamma(t_f)=0, \qquad \dot\beta(t_f)=0, \quad \gamma(\frac{t_f}{2})=\delta. \qquad (۸\text{-د})$$

فرض می‌کنیم که γ و β چند جمله‌ای به صورت زیر باشند:

$$\gamma(t)=\sum_{j=0}^{4}a_j t^j, \qquad (۹\text{-الف})$$

$$\beta(t)=\sum_{j=0}^{3}b_j t^j, \qquad (۹\text{-ب})$$

با اعمال شرایط مرزی ضرایب را به دست آورده خواهیم داشت:

$$\gamma(t)=\varepsilon+16(\delta-\varepsilon)\left(\frac{t}{t_f}\right)^2-32(\delta-\varepsilon)\left(\frac{t}{t_f}\right)^3+16(\delta-\varepsilon)\left(\frac{t}{t_f}\right)^4. \qquad (۱۰\text{-الف})$$

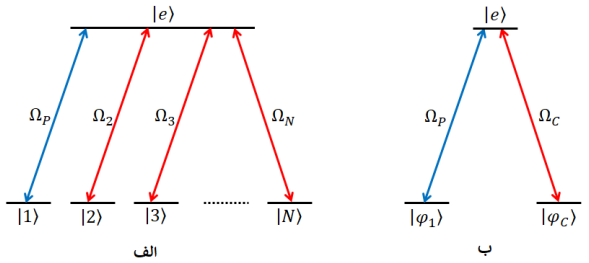
$$\beta(t)=\frac{3\pi}{2t_f^2}t^2-\frac{\pi}{t_f^3}t^3. \qquad (۱۰\text{-ب})$$

ایجاد برهم نهی همدوس حالتها در سیستم‌های N-پایه با استفاده از اصل ناوردایی لوییس-رزنفلد

در این بخش انتقال جمعیت در سیستم‌های N-پایه با N تراز دلخواه زمینه را مطالعه می‌کنیم. شکل ۲-الف الگوی جفت شدگی سیستم N-پایه را نمایش می‌دهد. هامیلتونی این سیستم در تقریب موج چرخان و در زیر فضای $\{|1\rangle,|e\rangle,|2\rangle,|e\rangle,|3\rangle,\cdots\}$ به صورت زیر خواهد بود:

$$H_0^{(N)}(t)=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&\Omega_p&0&0&\cdots&0\\ \Omega_p&0&\Omega_2&\Omega_3&\cdots&\Omega_N\\ 0&\Omega_2&0&0&\cdots&0\\ 0&\Omega_3&0&0&\cdots&0\\ \vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\ 0&\Omega_N&0&0&\cdots&0\end{pmatrix} \qquad (۱۱)$$

فرض می‌کنیم حالت اولیه سیستم $|\Psi(t_i)\rangle=|1\rangle$ باشد، می‌خواهیم جمعیت را از حالت اولیه به یک برهم‌نهی دلخواه حالت نهایی $|\Psi(t_f)\rangle=c_2|2\rangle+c_3|3\rangle+\ldots+c_N|N\rangle$ منتقل کنیم.



شکل ۲: الف) الگوی جفت‌شدگی سیستم N-پایه با فرکانس رابی مشخص.
ب) تصویر تبدیل سیستم N-پایه به سیستم سه ترازی لامبدا گونه.

به کارگیری این روش در سیستم‌های بیشتر از سه تراز به این معنی است که جمعیت را از تراز زمینه اول به برهم نهی دلخواه ترازهای زمینه دیگر منتقل کرد. هامیلتونی این سیستم‌ها پیچیده بوده و برای ساده سازی آن تبدیل موریس-شور [۱۰-۸] به کار گرفته خواهد شد. در این روش فرض می‌کنیم که وابستگی زمانی تمامی پالسهای استوکس یکسان باشد و توسط ماتریس تبدیل مناسب، سیستم N-پایه به سیستم سه ترازی در فضای جدید $\{|\varphi_1\rangle=|1\rangle,|e\rangle,|\varphi_c\rangle\}$ تبدیل می‌شود که هامیلتونی آن به صورت زیر خواهد بود:

$$H_0^T(t)=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&\Omega_p&0\\ \Omega_p&0&\Omega_C\\ 0&\Omega_C&0\end{pmatrix} \qquad (۱۲)$$

تراز $|\varphi_c\rangle$، برهم‌نهی از ترازهای پایه فضای قدیم خواهد بود(شکل ۲-ب). همچنین $\Omega_C(t)$ به صورت زیر خواهد بود:

$$\Omega_C(t)=\sqrt{\Omega_2^2+\Omega_3^2+\cdots+\Omega_N^2} \qquad (۱۳)$$

برای حالت مرزی اول پالسهای لیزری برای انتقال کامل جمعیت از تراز اول به برهم نهی یکسان از تراز های زمینه دیگر به صورت زیر طراحی می‌شوند.

$$\Omega_P(t)=\frac{\pi}{t_f}\cot\varepsilon\sin\frac{\pi t}{2t_f}, \qquad (۱۴\text{-الف})$$

$$\Omega_2(t)=c_2\frac{\pi}{t_f}\cot\varepsilon\cos\frac{\pi t}{2t_f}, \qquad (۱۴\text{-ب})$$

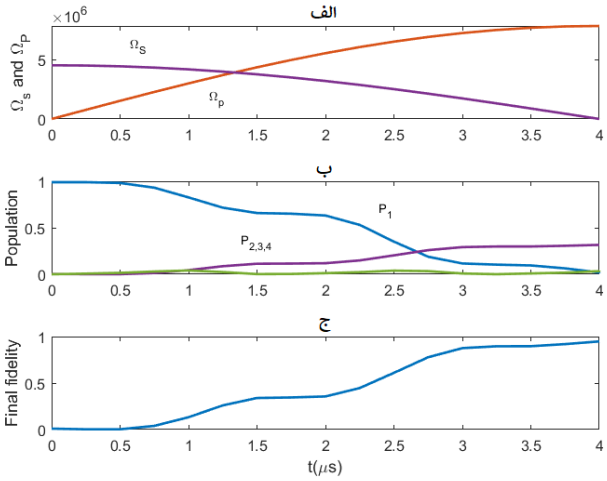
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$$\Omega_3(t) = c_3 \frac{\pi}{t_f} \cot\varepsilon \cos\frac{\pi t}{2t_f}, \qquad (۱۴-ج)$$

$$\vdots$$

$$\Omega_N(t) = c_N \frac{\pi}{t_f} \cot\varepsilon \cos\frac{\pi t}{2t_f}. \qquad (۱۴-د)$$

شکل ۳ تحول زمانی فرکانس‌های، جمعیت و وفاداری سیستم را برای حالت مطلوب $|\Psi_{desired}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|2\rangle+|3\rangle+|4\rangle)$ در یک سیستم چهار پایه را نشان می‌دهد.



شکل۳: الف) تغییرات زمانی فرکانس‌های پمپ و استوکس، ب) نمودار تحول زمانی جمعیت ترازها، ج) وفاداری سیستم برای حالت $\frac{1}{\sqrt{3}}(|2\rangle+|3\rangle+|4\rangle)$.

بسادگی قابل مشاهده است که جمعیت به درستی بصورت مساوی بین ترازهای مورد نظر تقسیم شده است.

برای حالت دوم، با توجه به شرایط مرزی پالسهای لیزری به صورت زیر طراحی می‌شوند.

$$\Omega_P(t) = 2\left(\dot{\beta}\cot\gamma\sin\beta + \dot{\gamma}\cos\beta\right). \qquad (۱۵-الف)$$

$$\Omega_2(t) = 2c_2\left(\dot{\beta}\cot\gamma\cos\beta - \dot{\gamma}\sin\beta\right). \qquad (۱۵-ب)$$

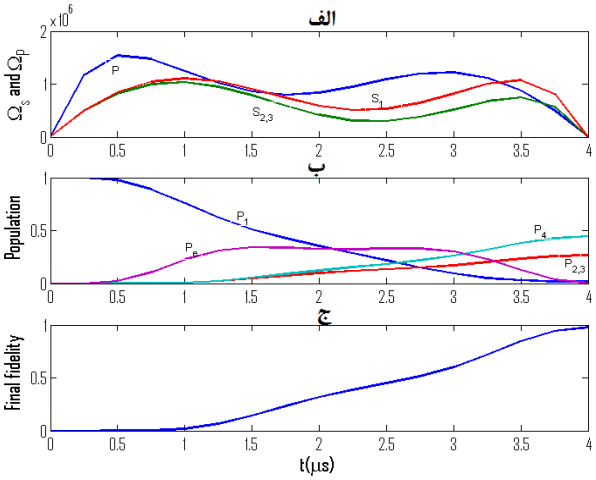
$$\Omega_3(t) = 2c_3\left(\dot{\beta}\cot\gamma\cos\beta - \dot{\gamma}\sin\beta\right). \qquad (۱۵-ج)$$

$$\vdots$$

$$\Omega_N(t) = 2c_N\left(\dot{\beta}\cot\gamma\cos\beta - \dot{\gamma}\sin\beta\right). \qquad (۱۵-د)$$

شکل ٤ یک مثال برای انتقال جمعیت از تراز زمینه اول به حالت زیر را نمایش می‌دهد.

$$|\Psi(t_f)\rangle = \frac{1}{2}(|2\rangle+|3\rangle) + \frac{1}{\sqrt{2}}|4\rangle \qquad (۱۶)$$



شکل ٤: الف) تغییرات زمانی فرکانس‌های پمپ و استوکس، ب) نمودار تحول زمانی جمعیت ترازها، ج) وفاداری سیستم برای حالت (۱۶).

نتایج

در این مقاله ایجاد برهم نهی همدوس حالتها در یک سیستم N - پایه با استفاده روش میانبر بر گذار بی دررو و بر پایه اصل ناوردایی لوییس-رزنفلد مطالعه شد. ابتدا پالسهای لیزری با استفاده از شرایط مرزی طراحی شد و با مطالعه عددی نشان داده شد که با استفاده از دو نوع شرایط مرزی می‌توان جمعیت را به صورت سریع و موثر از یک تراز منفرد زمینه اولیه به یک برهم نهی دلخواه از ترازهای زمینه دیگر منتقل کرد.

مرجع‌ها

[1] B.W. Shore, The Theory of Coherent Atomic Excitation Wiley, New York, (1990).
[2] N. V. Vitanov, A. A. Rangelov, B. W. Shore, and K. Bergmann, Rev. Mod, Phys, **89**, 015006 (2017).
[3] X. Chen, I. Lizuain, A. Ruschhaupt, D. Guéry-Odelin, and J. G. Muga, Phys. Rev. Lett. **105**, 123003 (2010).
[4] X. Chen and J. G. Muga, Phys. Rev. A **86**, 033405 (2012).
[5] M. Saadati-Niari, M. Kiazand, Acta. Phys. Pol. A, **138**, 794 (2020).
[6] N. Irani, M. Amniat-Talab, M. Saadati-Niari, J. Mod. Opt. **69**, 12 (2022).
[7] H. R. Lewis and W. B. Riesenfeld, J. Math. Phys. **10**, 1458 (1969).
[8] J. R. Morris and B. W. Shore, Phys. Rev. A. **27**, 906 (1983).
[9] A. A. Rangelov, N. V. Vitanov, and B. W. Shore, Phys. Rev. A. **74**, 053402 (2006).
[10] B. W. Shore, J. Mod. Opt. **61**, 787 (2014).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بهبود جذب در بلور فوتونی یک‌بعدی شامل مواد با فاز متغیر

طاهرزاده، سپیده [۱] ؛ کشاورز، علیرضا [۲]
[۱] دانشکده‌ی فیزیك، دانشگاه کاشان، کاشان
[۲] دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شیراز، شیراز

چکیده
با استفاده از مواد با ضریب‌شکست منفی و وانادیوم‌دی‌اکساید (VO_2) روی یک زیرلایه‌ی شیشه، تاثیر کسر پرشدگی وانادیوم‌دی‌اکساید، ضخامت لایه‌ها، زاویه‌ی تابش و نیز تناوب سلول‌واحد بر جذب نور در ساختار جدید به‌صورت نظری بررسی شده‌است. نتایج نشان می‌دهد که ارتفاع و پهنای قله‌ی جذب در فاز عایق وانادیوم‌دی‌اکساید ($f=0$)، از فاز رسانای آن ($f=1$) بزرگ‌تر است، بنابراین با انتخاب ضخامت مناسب می‌توان به جذب بالایی در طول‌موج‌های کوتاه در بازه‌ی نانومتر دست‌یافت. ارتفاع و پهنای قله‌ی جذب در دو فاز عایق و رسانای VO_2 به زاویه‌های تابش کوچک حساس نیست ولی در زاویه‌های تابش بزرگ، ارتفاع و پهنای قله‌ی جذب در هر دو فاز کاهش پیدا می‌کند. برای کنترل جذب، دما و فاز لایه VO_2 را می‌توان تغییر داد. این ساختار را می‌توان در دستگاه‌های جاذب نوری برای مدیریت و کنترل جذب استفاده‌نمود.

واژه‌های کلیدی: *وانادیوم‌دی‌اکساید ، مواد با فاز متغیر، بلور فوتونی، جذب.*

Improving Absorption in 1D Photonic Crystal Containing Phase Change Material

Taherzadeh, Sepideh [1]; Keshavarz, Alireza [2]

[1] *Faculty of Physics, University of Kashan, Kashan*
[2] *Department of Physics, Shiraz University of Technology, shiraz*

Abstract

The influence of VO_2 filling fraction, layer thicknesses, incident angle, and the period of a unit cell on light absorption is investigated theoretically, in new construction using a negative refractive index material with VO_2 on a glass substrate. Results show that the height and width of the absorption peak in the insulator phase (f=0) of VO_2 are greater than those in the metal phase (f=1), suggesting that strong absorption can be achieved by the right amount of VO_2 and negative index layer thickness over a short wavelength in the nanometer range. The height and width of the absorption peak in VO_2's insulator and metal phases are not sensitive to the small incident angles. In both phases, insulator and metal, the width and height of the peak decrease with increasing radiation angle. The temperature and phase of the VO_2 layer can be varied to control the absorbance. This structure, which may be used to manage and control absorption, can benefit optical absorber devices.

***Keywords**: Vanadium Dioxide, Phase Change Materials, Photonic Crystal, Absorption*

PACS No. ۸۱، ۷۳

مقدمه

بلورهای فوتونی یک بعدی، ساختاری فوتونیکی هستند که ضریب‌شکست آن‌ها به‌طور متناوب در یک بعد تغییر می‌کند. با استفاده از بلورهای فوتونی می‌توان انتشار نور را کنترل و خواص اپتیکی نظیر جذب و عبور را تنظیم کرد. بنابراین با طراحی نانوساختارهای بلورهای فوتونی می‌توان برخی از طول‌موج‌ها را عبور و برخی دیگر را منعکس یا جذب نمود[۱]. مواد با فاز متغیر موادی هستند که وقتی به یک دما یا ولتاژ معین می‌رسند، گذار فاز از رسانا به عایق یا برعکس را نشان می‌دهند. چنین موادی را می‌توان برای برنامه‌های کاربردی کلیدزنی استفاده‌نمود. پدیده‌ی گذار فاز از عایق به رسانا یا برعکس می‌تواند بسیار مفید باشد که توسط روش‌های تحریک‌کننده‌ی مختلف از جمله تغییر دما، فشار، میدان مغناطیسی یا الکتریکی رخ می‌دهند[۲]. کاربردهای مواد با فاز متغیر کاملاً متنوع است؛ علت آن توانایی این مواد برای نشان‌دادن تغییرات خاصیت در مقیاس زمانی فوق سریع است. با استفاده از این توانایی می‌توانیم یک سیستم کلیدزنی بسیار کارآمد و مقرون‌به‌صرفه ایجاد نماییم. جذب نور تابشی در بلورهای فوتونی موضوع مهمی در فیزیک به‌شمار می‌رود که

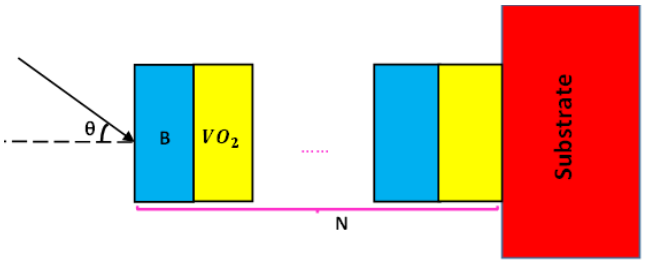
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

یکی از مهمترین مواد مورد استفاده در این زمینه به‌کارگیری مواد با فاز متغیر است که توجه فیزیک‌دانان زیادی را به خود جلب کرده‌است. وانادیوم‌دی‌اکساید یکی از مواد با فاز متغیر است که با تغییر دما ساختار شبکه‌ی آن تغییر می‌کند که ضریب‌شکست آن وابسته به دماست که مدل وابسته به دمایی برای توضیح خواص نوری آن استفاده می‌شود. تغییرات قله‌ی جذبی با زاویه‌ی تابش برای فاز عایق و رسانای وانادیوم‌دی‌اکساید بررسی شده‌است [۳]. وانادیوم‌دی‌اکساید می‌تواند بین فاز رسانا و عایق تغییر حالت یابد که اثرات تغییر ضخامت روی این تغییر حالت مطالعه شده‌است [۴]. ضریب‌جذب در ناحیه‌ی تراهرتز برای بلور فوتونی با لایه‌ی ترکیبی از وانادیوم‌دی‌اکساید و سیلیکون‌دی‌اکساید گزارش شده‌است [۵]. جاذبی با باند وسیعی از جذب با استفاده از این‌گونه مواد برای وسیله‌های نوری طراحی شده‌است [۶].

در ساختار دولایه‌ای متناوب جدید و نوآورانه‌ای که در ادامه بررسی می‌شود، مواد با ضریب‌شکست منفی و وانادیوم‌دی‌اکساید در کنار یکدیگر روی زیرلایه‌ی شیشه قرار گرفته‌اند. تاثیرات ضخامت لایه‌ها، زاویه‌ی تابش و تناوب سلول‌واحد در جذب برای فازهای عایق (f=0) و رسانای (f=1) وانادیوم‌دی‌اکساید به‌صورت نظری بررسی و نشان‌داده‌می‌شود که با ضخامت و تعداد لایه‌های کم می‌توان به نتایج مطلوبی رسید. داشتن نتایج مطلوب با تعداد و ضخامت کم لایه‌ها مزیت این ساختار است که باعث صرفه‌جویی در زمان، ماده و انرژی می‌شود و به‌علاوه باید یادآوری کرد که در بسیاری از جاذب‌های نوری نیز قابل استفاده است.

مبانی نظری

ساختار بلور فوتونی یک‌بعدی متناوب مانند شکل ۱ در نظر می‌گیریم که سلول‌واحد آن از مواد با ضریب‌شکست منفی و وانادیوم‌دی‌اکساید روی زیرلایه‌ی شیشه در نظر گرفته‌شده‌است. پذیرفتاری الکتریکی و تراوایی مغناطیسی ماده با ضریب‌شکست منفی به‌ترتیب $\varepsilon_B = -4$ و $\mu_B = 1$ است. N و d به‌ترتیب تناوب سلول‌واحد و ضخامت لایه را بیان می‌کند. تابش الکترومغناطیسی به‌صورت مایل با زاویه‌ی تابش θ بر سطح ساختار تابیده می‌شود.



شکل۱ : طرحی از بلور فوتونی یک بعدی روی زیرلایه‌ی شیشه.

تابع دی‌الکتریک وانادیوم‌دی‌اکساید طبق نظریه‌ی ماکسول-گارنت [۷] به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\varepsilon_s(\omega) = 1 + \frac{\varepsilon_n(i\infty) - 1}{1 - (\frac{\hbar\omega}{\omega_\infty})^2} + \sum_{i=1}^{7} \frac{S_{n.i}}{1 - \left(\frac{\hbar\omega}{\omega_{n.i}}\right)^2 - i\Gamma_{n.i}\frac{\hbar\omega}{\omega_{n.i}}}. \quad (۱)$$

$$\varepsilon_m(\omega) = 1 - \frac{\omega_{p.\tilde{n}}{}^2}{\hbar\omega(\hbar\omega + i\gamma_{\tilde{n}})} + \frac{\varepsilon_{\tilde{n}}(i\infty) - 1}{1 - \left(\frac{\hbar\omega}{\omega_\infty}\right)^2} + \sum_{i=1}^{4} \frac{S_{\tilde{n}.i}}{1 - \left(\frac{\hbar\omega}{\omega_{\tilde{n}.i}}\right)^2 - i\Gamma_{\tilde{n}.i}\frac{\hbar\omega}{\omega_{\tilde{n}.i}}}. \quad (۲)$$

$$\varepsilon_{VO2} = \varepsilon_s\left(\frac{\varepsilon_m(1+2f) - \varepsilon_s(2f-2)}{\varepsilon_s(2+f) + \varepsilon_m(1-f)}\right) \quad (۳)$$

جدول ۱ : مقادیر متغیرهای تابع دی‌الکتریک وانادیوم‌دی‌اکساید.

i	Sn	ωn (ev)	Γn	Sn	ωN (ev)	Γn
۱	۰/۷۹	۱/۰۲	۰/۵۵	۱/۸۱۶	۰/۸۶	۰/۹۵
۲	۰/۴۷۴	۱/۳۰	۰/۵۵	۰/۹۷۲	۲/۸	۰/۲۳
۳	۰/۴۸۳	۱/۵۰	۰/۵۰	۱/۰۴	۳/۴۸	۰/۲۸
۴	۰/۵۳۶	۲/۷۵	۰/۲۲	۱/۰۵	۴/۶	۰/۳۴
۵	۱/۳۱۶	۳/۴۹	۰/۴۷			
۶	۱/۰۶۰	۳/۷۶	۰/۳۸			
۷	۰/۹۹	۵/۱	۰/۳۸۵			

بدین‌ترتیب $\varepsilon_n(i\infty) = 4.26$ ،$\omega_\infty = 15\ eV$ ،$\gamma_{\tilde{n}} = 0.66$ و $\varepsilon_{\tilde{n}}(i\infty) = 3.95$ و $\omega_{p\tilde{n}} = 3.33\ eV$ است. K_{zj} مولفه‌ی z عددموج، c و ω به‌ترتیب سرعت و فرکانس نور در خلا است. با استفاده از فرمول‌بندی ماتریس انتقال [۸] می‌توان طیف جذبی را بدست‌آورد. M_{tot} ماتریس انتقال کل ساختار است که به‌صورت زیر معرفی می‌شود:

$$M_{total} = (M_B \times M_{VO2})^N \quad (۴)$$

$$T = \frac{q_s}{q_0}\left|\frac{2q_0}{(q_0 M_{(tot)11} + q_s M_{(tot)22} + q_s q_0 M_{(tot)12} + M_{(tot)21})}\right|^2 \quad (۵)$$

$$R = \left|\frac{(q_0 M_{(tot)11} - q_s M_{(tot)22} + q_s q_0 M_{(tot)12} - M_{(tot)21})}{(q_0 M_{(tot)11} + q_s M_{(tot)22} + q_s q_0 M_{(tot)12} + M_{(tot)21})}\right|^2 \quad (۶)$$

M_B و M_{VO_2} به‌ترتیب ماتریس انتقال لایه‌ی با ضریب‌شکست منفی و لایه‌ی وانادیوم‌دی‌اکساید است. تناوب ساختار با N نشان

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

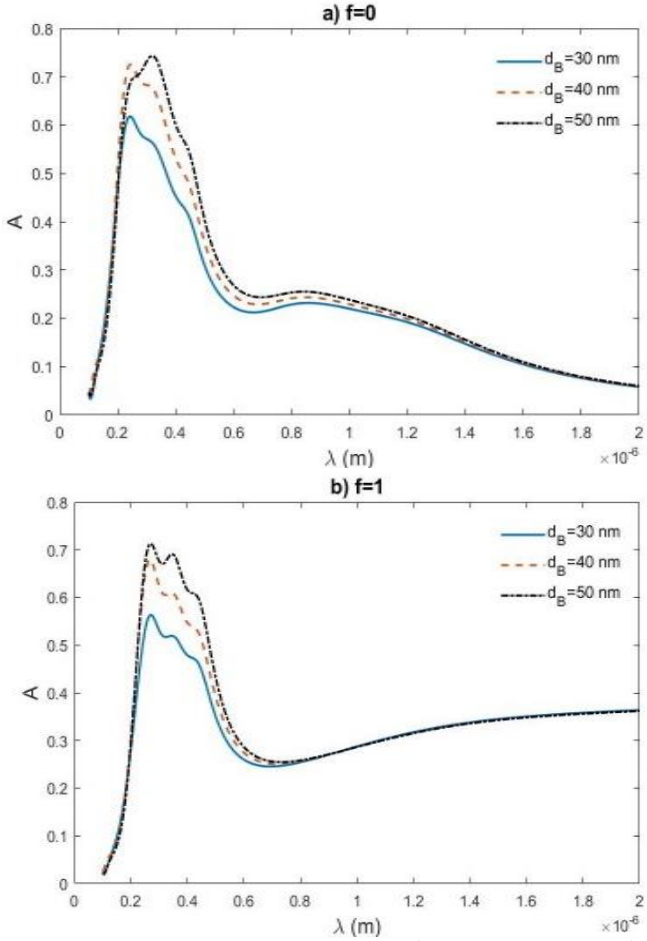
داده‌می‌شود. در نهایت ضریب جذب A با استفاده از فرمول زیر بدست می‌آید:

$$A = 1 - R - T. \quad (۷)$$

T و R به‌ترتیب ضریب عبور و انعکاس امواج الکترومغناطیسی تابشی در ساختار را نشان می‌دهد. نوع قطبش در نتایج تاثیری ندارد. در همه‌ی نمودارها تابش را به‌صورت عمود در نظر می‌گیریم.

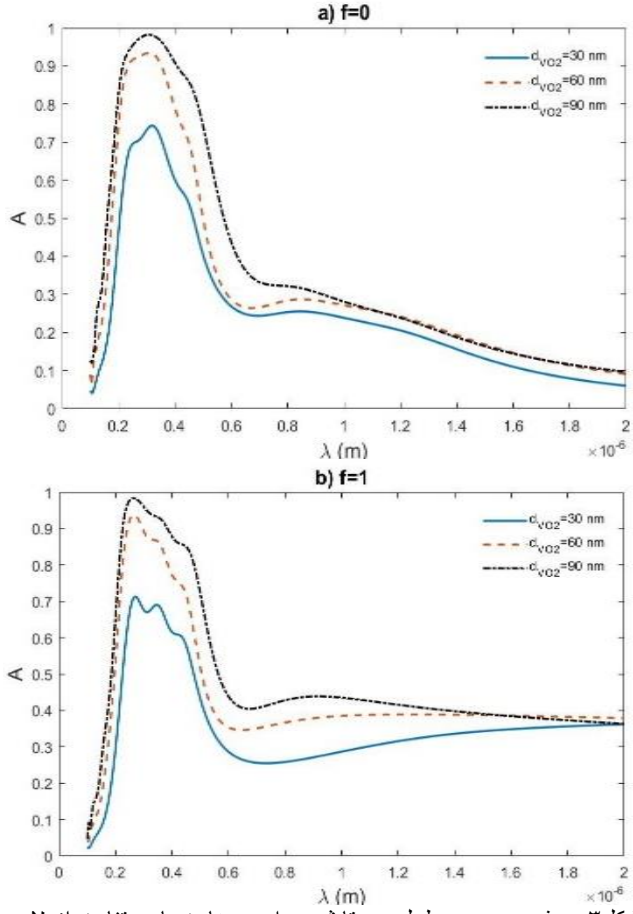
بحث و بررسی

ضریب جذب بر حسب طول‌موج تابشی برای ضخامت‌های متفاوت از ماده با ضریب‌شکست منفی در شکل ۲ رسم شده‌است که با انتخاب ضخامت مناسب از لایه با ضریب‌شکست منفی می‌توان ارتفاع و پهنای قله را افزایش داد. ارتفاع و پهنای قله‌ی جذبی با افزایش ضخامت لایه با ضریب‌شکست منفی برای هر دو فاز افزایش می‌یابد ولی این افزایش برای فاز عایق (f=0) بیشتر از فاز رسانای آن (f=1) است در نتیجه با تغییر دما و فاز می‌توان تغییرات قله‌ی جذبی را کنترل نمود.



شکل۲ : جذب بر حسب طول‌موج تابشی برای ضخامت‌های متفاوت لایه با ضریب‌شکست منفی با: $N=1,\ d_{VO_2} = 30\ nm$.

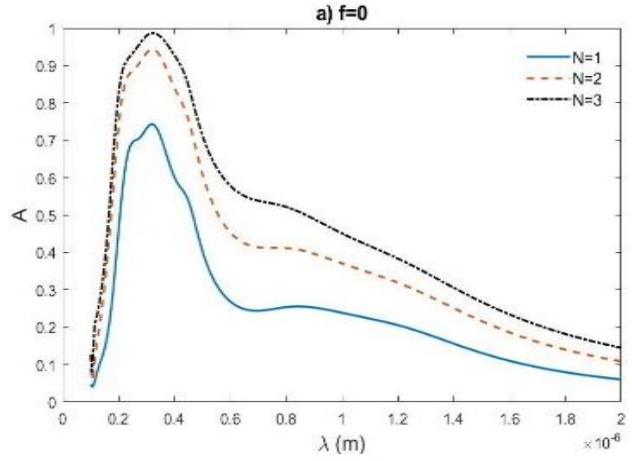
با افزایش ضخامت لایه با ضریب‌شکست منفی نیز می‌توان جذب بالاتری را انتظار داشت. پهنای قله‌ی جذبی برای هر دو فاز عایق و رسانا تقریبا در بازه‌ی ۵۰۰-۲۰۰ نانومتر است. در شکل ۳ ضریب جذب بر حسب طول‌موج تابشی برای ضخامت‌های متفاوت از لایه‌ی وانادیوم‌دی‌اکساید رسم شده‌است که ارتفاع و پهنای قله‌ی جذبی ساختار برای هر دو فاز وانادیوم‌دی‌اکساید، با افزایش ضخامت لایه‌ی وانادیوم‌دی‌اکساید افزایش می‌یابد با این تفاوت که افزایش ارتفاع و پهنای قله‌ی جذبی برای فاز عایق (f=0) بیشتر از فاز رسانا (f=1) است. در نتیجه با تغییر دما و فاز می‌توان تغییرات قله‌ی جذبی را کنترل نمود. این نمودار نشان می‌دهد که با افزایش اندک ضخامت لایه‌ی وانادیوم‌دی‌اکساید می‌توان قله‌ی جذبی را به یک رساند.

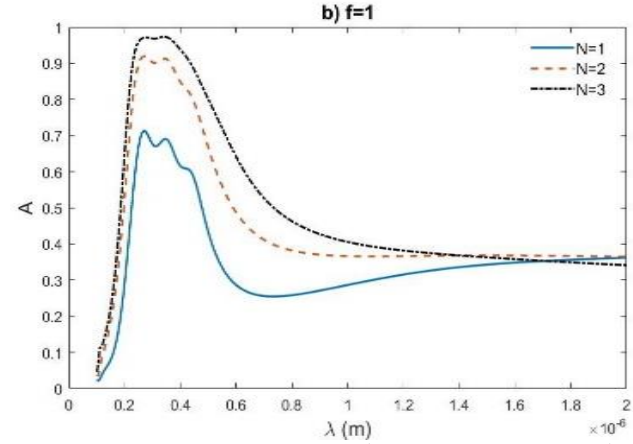


شکل۳ : جذب بر حسب طول‌موج تابشی برای ضخامت‌های متفاوت از لایه‌ی وانادیوم‌دی‌اکساید با: $N=1,\ d_B = 50\ nm$.

یکی دیگر از روش‌های افزایش پهنا و ارتفاع قله‌ی جذب، افزایش تناوب ساختار است که ارتفاع قله‌ی جذب را می‌توان به یک رساند. در شکل ۴ ضریب جذب بر حسب طول‌موج تابشی برای تناوب‌های متفاوت از سلول‌واحد رسم شده‌است که ارتفاع و پهنای قله‌ی جذبی برای هر دو فاز از لایه‌ی وانادیوم‌دی‌اکساید با افزایش تناوب سلول‌واحد افزایش می‌یابد؛ با این تفاوت که افزایش ارتفاع و پهنای قله‌ی جذبی برای فاز عایق (f=0) بیشتر از فاز رسانا (f=1) است. در نتیجه با تغییر دما و فاز می‌توان تغییرات قله‌ی جذبی را کنترل نمود.

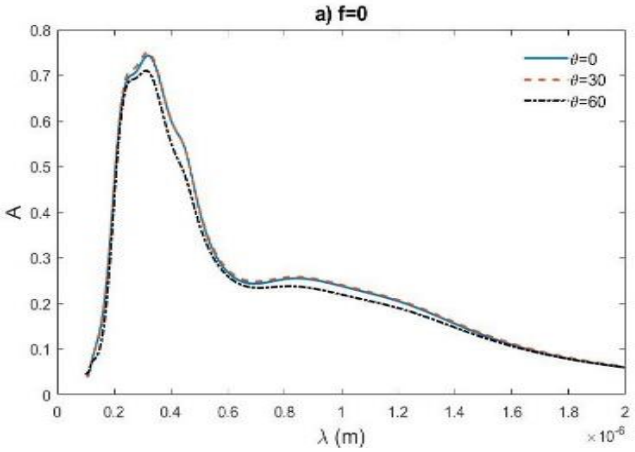
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

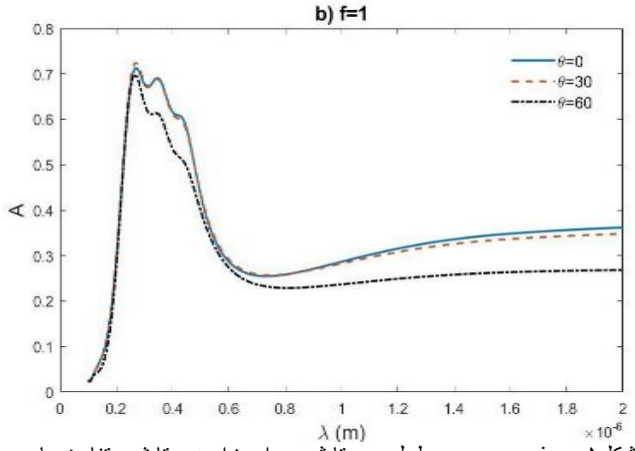




شکل۴ : جذب بر حسب طول‌موج تابشی برای تناوب‌های متفاوت از سلول‌واحد با: $d_{VO_2} = 30\ nm$,$d_B = 50\ nm$.

در شکل ۵ ضریب‌جذب برحسب طول‌موج تابشی برای زاویه‌ی تابشی متفاوت رسم شده‌است. تغییرات ارتفاع قله‌ها برای زاویه‌ی تابش کوچک در دو فاز عایق (f=0) و رسانا (f=1) کم است ولی با افزایش زاویه‌ی تابش این حساسیت افزایش می‌یابد تا این‌که در زاویه‌ی تابش ۶۰ درجه تغییرات زیادی در ارتفاع قله‌ها نسبت به حالت فرود عمود مشاهده می‌شود؛ یعنی، در زاویه تابش بالا ارتفاع و پهنای قله‌ی جذبی کمتر از حالت فرود عمود است.





شکل۵ : جذب بر حسب طول‌موج تابشی برای زاویه‌ی تابش متفاوت با: $d_{VO_2} = 30\ nm$,$d_B = 50\ nm$, N=1.

نتیجه‌گیری

با درنظر گرفتن ماده با ضریب‌شکست منفی و وانادیوم‌دی‌اکساید بر روی زیرلایه‌ی شیشه، قله‌ی جذبی مرتفع در بازه‌ی طول‌موجی ۵۰۰-۲۰۰ نانومتر بدست‌می‌آید که این قله‌ی جذبی را می‌توان با متغیرهای متفاوت از جمله: ضخامت لایه‌ها، زاویه‌ی تابش و تناوب سلول‌واحد کنترل نمود. در شرایط یکسان، قله‌ی جذبی در فاز عایق (f=0) مرتفع‌تر و پهن‌تر از فاز رسانا (f=1) است. دما و فاز لایه‌ی وانادیوم‌دی‌اکساید نیز بر جذب سیستم تاثیر دارد و عاملی مهمی برای کنترل قله‌های جذبی در این ساختار به‌شمار می‌آید. داشتن قله‌ی جذب مرتفع و پهن با تعداد و ضخامت کم لایه‌ها مزیت این ساختار است که باعث صرفه‌جویی در ماده و انرژی می‌شود.

مرجع‌ها

[۱] C. Nayak, A. Aghajamali and A. Saha; "Double-negative multilayer containing an extrinsic random layer thickness magnetized cold plasma photonic quantum-well defect"; *Superlattices and Microstructures* **111**, 2017 (2017) 248-254.

[۲] P. P. Boriskov, A. A. Velichko, A. L. Pergament, G. B. Stefanovich, and D. G. Stefanovich; "The Effect of an Electric Field on a Metal–Insulator Phase Transition in Vanadium Dioxide"; *Technical Physics Letters* **28**, No. 5 (2002) 406–408.

[۳] A. Rashidi, A. Hatef and A. Namdar; "On the Enhancement of Light Absorption in Vanadium Dioxide/1D Photonic Crystal Composite Nanostructures"; *Journal of Physics D: Applied Physics* **51**, No. 37 (2018).

[۴] M. Zhu, H. Wang, C. Li, H. Qi, D. Zhang and W. Lv; "Thickness-modulated thermochromism of vanadium dioxide thin films grown by magnetron sputtering"; *Surf Coatings Technol* **359**, (2019) 396–402.

[۵] J. Liang, P. Li, X. Song and L. Zhou; "The fabrication and visible–near-infrared optical modulation of vanadium dioxide/silicon dioxide composite photonic crystal structure"; *Appl Phys A Mater Sci Process* **123**, No. 794 (2017) 1–7.

[۶] F. Bendelala, A. Cheknane and H. S. S. Hilal; "Thermally switchable meta-material absorber involving vanadium dioxide semiconductor-metal transition for thermo photovoltaic conversion"; *Materials Research Express* **5**, No. 1 (2018).

[۷] I. Pirozhenko and A. Lambrecht; "Influence of slab thickness on the Casimir force"; *Phys Rev A - At Mol Opt Phys* **77**, No. 1 (2008).

[۸] F. L. Pedrotti and L. S. Pedrotti; "*Introduction to Optics*"; 2th edition, Prentince-Hall Inc, New Jersey, EU. (1998)

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

شکل پیشنهادی جدید برای معادله فدیف در سیستم‌های مقید سه‌جسمی

محمدزاده، مهسا[۱] ؛ رادین، مهدی[۱] ؛ هادی‌زاده، محمدرضا[۲]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه خواجه نصیرالدین طوسی، تهران

[۲] دانشکده فیزیک و نجوم دانشگاه اوهایو، آمریکا

چکیده

در این مقاله شکل پیشنهادی جدیدی برای معادله فدیف در سیستم‌های مقید سه‌جسمی ارائه داده‌ایم. دراین شکل جدید، مستقیما از برهم کنش‌های دو جسمی بهره می بریم و از بکار بردن عملگر انتقال دو جسمی t در معادله فدیف اجتناب می‌کنیم. برای تست فرمول‌بندی پیشنهادی جدید، با استفاده از پتانسیل‌های مالفلیت-تیجن و یاماگوچی معادله فدیف را حل نموده و انرژی بستگی و تابع موج سیستم مقید سه نوکلئونی را محاسبه نموده‌ایم. نتایج بدست آمده از هر دو فرمول بندی در توافق بسیار خوبی نسبت به هم قرار دارند.

واژه های کلیدی: *سیستم مقید سه جسمی، معادله فدیف، پتانسیل مالفلیت-تیجن.*

The New Suggested form for the Faddeev equation in three-body bound states

Mohammadzadeh, Mahsa[1]; Radin, Mahdi[1]; Hadizadeh, Mohammadreza[2]

[1] *K. N. Toosi University of Technology, Department of Physics, Tehran*

[2] *Ohio University, Department of Physics & Astronomy, USA*

Abstract

In this paper, we propose a new form of the Faddeev equation for the three-body bound states. In this new form of the Faddeev equation we work directly with two-body interactions and avoid two-body transition operator, t. To test the new formalism, we apply Malfliet-Tjon and Yamaguchi potentials in two formalisms and we calculate the binding energy and wave function of three-nucleon system. The results obtained from both formalisms are in good agreement with each other.

***Keywords**: three-body bound states, Faddeev equation, Malfliet-Tjon potential.*

PACS No. 20

مقدمه

مطالعه سیستم‌های سه‌جسمی با استفاده از حل معادله فدیف صورت می پذیرد. معادله فدیف یک فرمول‌بندی غیراختلالی از معادله شرودینگر برای مسائل سه‌جسمی ارائه می‌دهد و یک حل آسان برای رسیدن به همگرایی فراهم می‌کند. حل معادله فدیف در فضای پیکربندی و فضای تکانه خطی و زاویه‌ای برای بررسی و مطالعه حالت مقید و پراکندگی سیستم‌های سه‌جسمی در حوزه‌های مختلف فیزیک از فیزیک اتمی گرفته تا فیزیک هسته‌ای و ذرات بنیادی تاکنون موضوع مورد مطالعه بسیاری از تحقیقات علمی بوده است[۵-۳].

در این مقاله شکل پیشنهادی جدیدی از معادله فدیف برای توصیف سیستم‌های مقید سه‌جسمی ارائه داده ایم که بطور مستقیم از برهم

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

کنش دوجسمی در آن استفاده می‌شود و دیگر نیازی به حل معادله لیپمن–شوئینگر و محاسبه ماتریس انتقال دوجسمی t و استفاده از آن برای حل عددی معادله فدیف نیست. از دیگر مزیت فرمولبندی جدید ارائه شده افزایش قابل ملاحظه سرعت اجرای برنامه محاسباتی نسبت به معادله فدیف مرسوم قبلی می‌باشد.

در ادامه جهت تست فرمولبندی جدید ارائه شده با استفاده از پتانسیل‌های یاماگوچی و مالفلیت–تیجن با استفاده از هر دو شکل از معادلات فدیف، انرژی بستگی و تابع موج سیستم مقید سه نوکلئونی را محاسبه نموده و نتایج را با هم مقایسه نموده ایم.

معادله فدیف برای سیستم مقید سه جسمی

حالت مقید غیرنسبیتی سه ذره به جرم‌های یکسان m و با درنظر گرفتن برهم کنش‌های جفتی V توسط معادله مرسوم فدیف توصیف می‌شود [۱]:

$$\psi = G_0 t P \psi \qquad (۱)$$

که در آن G_0 انتشارگر آزاد سه جسمی و P عملگر جایگشت میان ذرات می‌باشد که توسط رابطه زیر داده می‌شود:

$$P = P_{12}P_{23} + P_{13}P_{23} \qquad (۲)$$

همچنین t عملگر انتقال دوجسمی است که از معادله لیپمن–شوئینگر پیروی می‌کند:

$$t = V + VG_0 t \qquad (۳)$$

این معادله را درفضای تکانه خطی بصورت زیر داریم:

$$t(\mathbf{p}', \mathbf{p}, \epsilon) = V(\mathbf{p}', \mathbf{p}) + \int d\mathbf{p}'' \frac{V(\mathbf{p}', \mathbf{p}'', \epsilon) t(\mathbf{p}'', \mathbf{p}, \epsilon)}{\epsilon - \frac{\mathbf{p}''^2}{m}} \qquad (٤)$$

که در آن $\epsilon = E - \frac{3q^2}{4m}$ انرژی زیر سیستم دوجسمی می باشد.

معادله فدیف (۱) نیز در فضای تکانه خطی توسط معادله انتگرالی سه بعدی زیرداده می‌شود[۲].

$$\psi(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{E - \frac{p^2}{m} - \frac{3q^2}{4m}} \int d\mathbf{q}'\, t^S(\mathbf{p}, \tilde{\boldsymbol{\pi}}, \epsilon) \psi(\boldsymbol{\pi}, \mathbf{q}') \qquad (۵)$$

که در آن

$$\tilde{\boldsymbol{\pi}} = \frac{1}{2}\mathbf{q} + \mathbf{q}', \qquad \boldsymbol{\pi} = \frac{1}{2}\mathbf{q}' + \mathbf{q} \qquad (٦)$$

ماتریس انتقال دوجسمی متقارن t^S به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$t^S(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \epsilon) = t(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \epsilon) + t(-\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \epsilon) \qquad (۷)$$

برای محاسبه انرژی بستگی یک سیستم مقید سه‌جسمی و بدست آوردن تابع موج ψ، معادله انتگرالی (۵) را باید به صورت عددی حل نماییم. بدین منظور ابتدا باید معادله انتگرالی (٤) را به ازای تمامی مقادیر ϵ به صورت عددی حل نموده و عناصر ماتریسی عملگر انتقال t را محاسبه نماییم. در نهایت با قرار دادن آن در معادله انتگرالی (۵) و حل این معادله به صورت یک معادله ویژه مقداری، انرژی بستگی و تابع موج سیستم سه جسمی را محاسبه نماییم.

در ادامه این بخش شکل جدیدی برای معادله فدیف پیشنهاد می‌دهیم که در آن اثری از ماتریس انتقال t نیست و مستقیما برحسب برهمکنش دوجسمی V ارائه شده است. بدین منظور با قرار دادن مستقیم معادله (۳) در معادله (۱) داریم:

$$\begin{aligned}\psi &= G_0 t P \psi \\ &= G_0 (V + VG_0 t) P \psi \\ &= G_0 V P \psi + G_0 V G_0 t P \psi\end{aligned} \qquad (۸)$$

در نهایت با قرار دادن ψ به جای $G_0 t P \psi$ در جمله دوم معادله بالا بر اساس معادله (۱)، معادله فدیف را برای یک سیستم مقید سه جسمی به صورت زیر خواهیم داشت:

$$\psi = G_0 V (1 + P) \psi \qquad (۹)$$

نمایش معادله فدیف پیشنهادی جدید در فضای تکانه خطی منجر به معادله انتگرالی سه بعدی زیر می‌شود:

$$\psi(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{E - \frac{p^2}{m} - \frac{3q^2}{4m}} \left\{ \int d\,\mathbf{q}' V^S(\mathbf{p}, \boldsymbol{\pi}) \psi(\boldsymbol{\pi}, \mathbf{q}') \right\} + \frac{1}{2} \int d\,\mathbf{p}' V^S(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \psi(\mathbf{p}', \mathbf{q}) \qquad (۱۰)$$

که در آن برهمکنش دوجسمی متقارن به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$V^S(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = V(\mathbf{p}, \mathbf{p}') + V(-\mathbf{p}, \mathbf{p}') \qquad (۱۱)$$

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

حل عددی و نتایج

با بکاربردن پتانسیل مالفلیت-تیجن و یاماگوچی معادلات انتگرالی (۵) و (۱۰) را به صورت عددی حل می نماییم. بدین منظور ابتدا فضا را با استفاده از روش حل انتگرالی گاوس-لژاندر گسسته نموده و با تبدیل معادلات فوق به معادلات ویژه مقداری، با استفاده از روش تکرار لنکزوس انرژی بستگی و تابع موج سیستم سه نوکلئونی را محاسبه نموده‌ایم.

در جدول (۱) همگرایی مربوط به محاسبه انرژی بستگی سیستم سه‌نوکلئونی برحسب تعداد نقاط شبکه استفاده شده در محاسبات عددی برای هر دو پتانسیل نشان داده شده است.

جدول۱ : همگرایی انرژی مقید سه‌نوکلئونی برحسب تعداد نقاط شبکه برای تکانه های ژاکوبی p, q برای پتانسیل های مالفلیت-تیجن و یاماگوچی. همه نتایج برحسب MeV هستند.

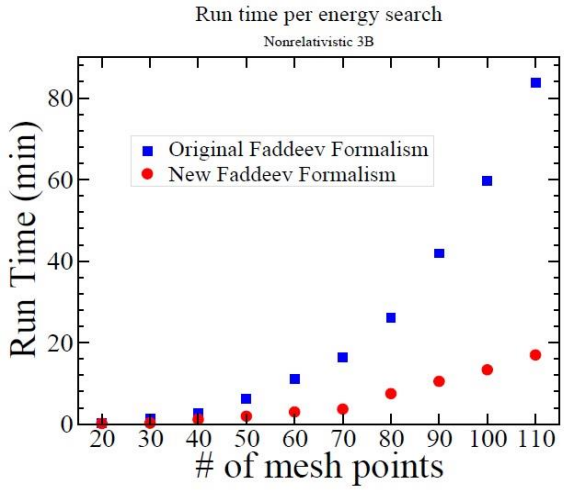
تعداد نقاط شبکه		پتانسیل مالفلیت-تیجن		پتانسیل یاماگوچی	
N_p	N_q	E_{old}	E_{new}	E_{old}	E_{new}
۲۰	۲۰	-۷/۹۵۶۲	-۷/۹۵۵۷	-۸/٤۹۸٤	-۸/٤۹۸۳
۳۰	۳۰	-۷/۷۹۷۱	-۷/۷۹٦٦	-۸/۵۰۵۸	-۸/۵۰۵۷
٤۰	٤۰	-۷/۷٤۷۵	-۷/۷٤٦۸	-۸/۵۰۷۸	-۸/۵۰۷۸
۵۰	۵۰	-۷/۷٤۷۳	-۷/۷٤٦۵	-۸/۵۰۸۵	-۸/۵۰۸٤
٦۰	٦۰	-۷/۷۳۹۹	-۷/۷۳۹۲	-۸/۵۰۸۷	-۸/۵۰۸٦
۷۰	۷۰	-۷/۷۳۹۸	-۷/۷۳۹۱	-۸/۵۰۸۸	-۸/۵۰۸۷
۸۰	۸۰	-۷/۷۳۷۹	-۷/۷۳۷۲	-۸/۵۰۸۹	-۸/۵۰۸۸
۹۰	۹۰	-۷/۷۳۷۱	-۷/۷۳٦٤	-۸/۵۰۸۹	-۸/۵۰۸۸
۱۰۰	۱۰۰	-۷/۷۳٦۸	-۷/۷۳٦۱	-۸/۵۰۸۹	-۸/۵۰۸۸

به عنوان یک تست دیگر مقادیر چشمداشتی هامیلتونی آزاد سه نوکلئونی، برهم کنش دو جسمی و هامیلتونی سیستم سه نوکلئونی را با استفاده از تابع موج محاسبه شده برای هر دو پتانسیل محاسبه نموده‌ایم. این نتایج را در جدول ۲ گزارش نموده‌ایم. نتایج ارائه شده از هر دو فرمولبندی در جداول ۱ و ۲ بیانگر توافق بسیار خوب آنها نسبت به هم می‌باشد.

جدول۲: مقادیر چشمداشتی هامیلتونی آزاد، برهم‌کنش دوجسمی و هامیلتونی سیستم سه‌نوکلئونی محاسبه شده با پتانسیل های مالفلیت-تیجن نوع پنج و یاماگوچی با هر دو شکل معادله فدیف. همه نتایج برحسب MeV هستند.

فرمول بندی	$< H_0 >$	$< V >$	$< H >$	E
پتانسیل مالفلیت-تیجن				
جدید	۲۹/۷٦۵۹	-۳۷/۵۰۳۷	-۷/۷۳٦۰	-۷/۷۳۷۷
قدیم	۲۹/۷۷۰٤	-۳۷/۵۰۸۰	-۷/۷۳٦۸	-۷/۷۳۷٦
پتانسیل یاماگوچی				
جدید	۳۳/۸٦۷۸	-٤۲/۳۷۸٦	-۸/۵۰۸۸	-۸/۵۱۰۷
قدیم	۳۳/۸٦۸۲	-٤۲/۳۷۹۰	-۸/۵۰۸۹	-۸/۵۱۰۷

از دیگر مزیت‌های فرمول بندی جدید ارائه شده کاهش قابل توجه زمان اجرای برنامه محاسباتی می‌باشد که همانطور که در شکل ۱ نشان داده شده است برای تعداد بالا نقاط شبکه زمان اجرای برنامه محاسباتی بطور قابل ملاحظه‌ای کوتاه‌تر شده است.



شکل۱ :زمان اجرا درهربار جست وجو انرژی برای محاسبات سه جسمی با استفاده از فرمالیسم فدیف جدیدو اصلی.

نتیجه‌گیری

دراین مقاله شکل جدیدی از معادله فدیف برای حالت مقید سه جسمی ارائه داده‌ایم. دراین شکل جدید بجای عملگر انتقال دوجسمی t بطور مستقیم با برهم کنش‌های دوجسمی V کار می کنیم. بنابراین دیگر نیازی به حل معادله انتگرالی لیپمن-شوئینگر برای محاسبه عناصر ماتریسی عملگر انتقال دو جسمی t به ازای انرژی‌های زیر سیستم دوجسمی سیستم سه‌جسمی نداریم.

در ادامه با استفاده از پتانسیل های مالفلیت-تیجن و یاماگوچی، سیستم مقید سه نوکلئونی را با هر دو فرمول‌بندی مورد مطالعه قرار دادیم و نشان دادیم که نتایج بدست آمده از هر دو فرمولبندی در

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

توافق بسیار خوبی نسبت به هم قرار دارند. در ادامه برآنیم تا این روش را برای پراکندگی سیستم‌های سه جسمی و سیستم های مقید چهارجسمی بکار ببریم.

مرجع‌ها

[1] A. Stadler and F. Gross Phys. Rev. Lett. **78**, 26 (1997).

[2] Ch. Elster, W. Schadow, A. Nogga and W. Glöckle, Few-Body Systems **27**, 83 (1999).

[3] S. P. Merkuriev, SP Merkuriev, SL Yakovlev and C. Gignoux, Nucl. Phys. A**431**, 125 (1984).

[4] H. Kamada and W. Glöckle, Nucl. Phys. A548, 205 (1992).

[5] H. Kamada et al., Phys. Rev. C 64, 044001 (2001).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

به‌کارگیری یادگیری ماشین برای تحلیل داده‌های پروفایل عمقی نوترون

یونسی، مرتضی؛ مسعودی، سید فرهاد؛ رسولی، فاطمه‌سادات

گروه فیزیک هسته‌ای، دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران، ایران

چکیده

روش پروفایل عمقی نوترونی (NDP) یک تکنیک تحلیلی هسته‌ای است که امکان تعیین نوع و توزیع غلظت برخی هسته‌های سبک را بر حسب عمق در مواد فراهم می‌سازد. در این پژوهش، امکان استفاده از شبکه عصبی مصنوعی در تحلیل داده‌های پروفایل عمقی نوترونی بررسی شده است. برای نیل به این هدف، ترکیبی از سیلیکون به‌عنوان ماده میزبان به همراه غلظت‌های مختلفی از ^{10}B به‌عنوان نمونه در نظر گرفته شد و طیف آلفای ناشی از اندرکنش $^{10}B(n,\alpha)^{7}Li$ در چیدمان NDP، با استفاده از مدل سازی این برهم‌کنش در کد MCNP محاسبه گردید. شبیه‌سازی‌های کد MCNP به‌طور مستقل برای ۲۵۶ نمونه صورت پذیرفت، که در آن‌ها غلظت ^{10}B به صورت تصادفی و براساس یک تابع توزیع لجستیک درنظر گرفته‌شده است. داده‌های مربوط به ۲۵۶ نمونه، شامل اطلاعات طیف انرژی آلفا، به‌عنوان ماتریس ورودی و پارامترهای درنظر گرفته شده براساس تابع توزیع لجستیک مد نظر به‌عنوان ماتریس خروجی، با هدف یادگیری شبکه عصبی (ANN) به ماشین داده شد. پس از آموزش شبکه، طیف آلفای به‌دست آمده از شبیه سازی نمونه‌های مجهول به عنوان ورودی ANN آموزش داده شده در نظر گرفته شده و پروفایل عمقی ^{10}B محاسبه گردید. تطابق مناسب پروفایل عمقی غلظت ^{10}B پیش‌بینی شده با مقادیر دقیق آن، امکان استفاده از ANN برای پیش‌بینی تابع توزیع لجستیک برازش شده بر روی غلظت عمقی نمونه مجهول را تایید نمود.

واژه‌های کلیدی: *پروفایل عمقی نوترونی (NDP)، MCNP، مونت‌کارلو، شبکه عصبی مصنوعی، یادگیری ماشین، متلب*

Data analyzing of Neutron Depth Profiling using machine learning

Younesi, Morteza; Masoudi, S. Farhad; Rasouli, Fatemeh S.
Department of Physics, K. N. Toosi University of Technology, Tehran, Iran

Abstract

Neutron Depth Profiling (NDP), as a nuclear analytical technique, determines both the concentration and depth-distribution of the specific types of light elements in the sample. The present work investigates the possibility of using an Artificial Neural Network (ANN) to analysis Neutron Depth Profiling (NDP) spectra. To achieve this goal, a compound sample of silicon as host material containing various concentrations of ^{10}B was considered and MCNP Monte Carlo code was used to simulate the alpha energy spectrum of the samples during a $^{10}B(n,\alpha)^{7}Li$ interaction in NDP. The MCNP simulations were performed for 256 samples in which their distribution of ^{10}B concentration was generated randomly using a Logistic distribution function. The data corresponding to 256 samples, including the alpha energy spectrum as input matrix and generated parameters based on Logistic distribution function as target matrix, was used to train an ANN. After training the ANN, the alpha energy spectra of unknown samples was considered as ANN input and the depth profile of ^{10}B was obtained. An acceptable agreement between the predicted B-10 concentration profile and its exact values confirmed the possibility of using ANN to predict the Logistic distribution function fitted to the depth concentration of the unknown sample.

***Keywords**: Neutron Depth Profiling (NDP), MCNP, Monte Carlo, Artificial Neural Network (ANN), Machine Learning, MATLAB*
PACS No. 20, 29

مقدمه

تاکنون روش‌های متنوعی برای آنالیز یک ماده، تعیین نوع ایزوتوپ و توزیع غلظت آن، نظیر روش‌های مرسوم شیمیایی و فیزیکی، ابداع و به کار گرفته شده که عموماً یا مخرب هستند و یا دارای دقت و حساسیت کافی نمی‌باشند. همچنین در اندازه‌گیری پروفایل غلظت به دلیل عدم وجود روش‌های مشاهده‌پذیری مناسب برای عناصر سبک به اندازه عناصر سنگین، پیشرفتی رخ نداده است. در این میان، عناصر سبک با روش‌های رایج مانند RBS، PIXE،

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

SIMS، AES و دیگر روش‌های غیرهسته‌ای قابل مشاهده نبودند [۱]. تکنیک‌های مبتنی بر نوترون به‌دلیل اندرکنش‌های نوترونی با هسته‌های اتمی، برای تعیین کمیت عناصر سبک مناسب هستند [۲]. روش هسته‌ای پروفایل عمقی نوترونی (NDP)، امکان انجام چنین سنجش‌هایی را ممکن ساخته است. این روش یک تکنیک تحلیلی هسته‌ای غیرمخرب می‌باشد که با استفاده از آن می‌توان به نوع و توزیع غلظت در عمق برای برخی ایزوتوپ‌های سبک، مانند ^{10}B، ^{40}K، ^{14}N، ^{35}Cl، ^{3}He، ^{6}Li، ^{33}S، ^{17}Oو همچنین چند هسته پرتوزا مانند ^{7}Be، ^{22}Na و ^{57}Ni به‌صورت کمّی و در ناحیه نزدیک به سطح جامدات پی برد [۳]. در حقیقت این هسته‌ها دارای سطح مقطع بسیار بزرگی درحد چندین kbarn با نوترون حرارتی (و سرد) برای اندرکنش‌های (n,p) و (n,α) می‌باشند [۱]. این تکنیک اولین‌بار توسط Ziegler در سال ۱۹۷۲ برای تعیین غلظت ناخالصی ^{10}B در ویفرهای سیلیکونی با استفاده از بمباران نوترونی نمونه و نیز تجزیه و تحلیل انرژی آلفاهای گسیل‌شده، معرفی شد [۴]. Biersack، Fink و Downing پژوهشگرانی بودند که ایده زیگلر را به ایزوتوپ‌های سبک دیگر گسترش داده و توانایی‌های این تکنیک را بهبود بخشیدند [۳ و۱]. روش NDP به‌صورت گسترده به‌منظور مشخصه‌یابی بور موجود در سیلیکون و نیز لیتیوم موجود در باتری‌های لیتیومی و نیز کاربردهای دیگر مورد استفاده قرار می‌گیرد [۴].

در این پژوهش، با شبیه‌سازی یک چیدمان NDP توسط کد MCNP و با بهره‌گیری از ابزار ANN، امکان تعیین و اندازه‌گیری غلظت ^{10}B بر حسب عمق در داخل Si بررسی شده و توانایی و امکان جایگزینی این روش با فرمول‌بندی‌های پیچیده توزیع غلظت، مطالعه می‌شود.

روش‌ها و شبیه‌سازی

روش NDP بر اساس اصل شناسایی و اندازه‌گیری انرژی برجای مانده از ذرات باردار گسیل‌شده از نمونه تحت بررسی در پی پرتودهی با نوترون‌ها استوار است. در این روش، باریکه‌ای از نوترون‌های حرارتی (و سرد) با شدت‌های نسبتاً بالا و تا حد امکان همسوسازی و موازی‌شده، به سمت ماده نمونه موردنظر تابانده می‌شوند. این نوترون‌ها با هسته‌های سبک موجود در ماده اندرکنش کرده و معمولاً یک یا چند ذره باردار سنگین مانند آلفا، پروتون یا تیریتیوم و نیز یک هسته پس‌زده شده با انرژی جنبشی مشخص، که با Q-Value واکنش تعیین می‌شود، را تولید می‌نمایند [۵ و۳]. ذرات باردار گسیل‌شده از سطح ماده ممکن است قبل از متوقف شدن، از سطح ماده خارج شوند. برد این ذرات باردار به انرژی، جرم، بار و توان توقف ماده میزبان بستگی دارد. ذره باردار همسانگرد گسیل‌شده و هسته پس زده‌شده در مسیر خروج از ماده، انرژی خود را از دست می‌دهند. ذرات باردار سنگین تولیدشده، در لحظه تولد، کاملاً تک‌انرژی می‌باشند [۵]. با اندازه‌گیری انرژی باقیمانده ذرات باردار که از نمونه خارج می‌شوند، طول مسیر ذرات باردار را می‌توان از روی توان توقف ماده، طبق رابطه ۱ تعیین نمود:

$$p = \int_{E_{(p)}}^{E_0} \frac{\mathrm{d}E}{S_{(E)}} \qquad (۱)$$

که در آن p مسافت پیموده‌شده توسط ذره باردار در طول ماده، E_0 انرژی ذره باردار در لحظه تولد، $E_{(p)}$ انرژی ذره‌ی باردار که در آشکارساز ثبت شده و $S_{(E)}$ توان توقف ذره باردار با انرژی E در ماده است [۴]. برای جلوگیری از اتلاف انرژی پس از خروج ذرات از سطح نمونه، روش NDP در محیط خلاء انجام می‌شود [۵].

در برخورد نوترون حرارتی با ^{10}B (که سطح مقطع برهم‌کنش آن با نوترون حرارتی برابر با ۳۸۴۰ barn است) مطابق روابط ۲ و ۳ داریم:

$$n + {}^{10}B \rightarrow {}^{4}He(1.472\,MeV) + {}^{7}Li(0.839\ MeV) + \gamma(0.478\ MeV) \qquad (۲)$$

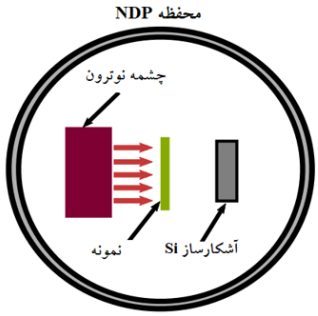
$$n + {}^{10}B \rightarrow {}^{4}He(1.776\,MeV) + {}^{7}Li(1.014\ MeV) \qquad (۳)$$

که اندرکنش اول با احتمال ۹۳/۷٪ و اندرکنش دوم نیز با احتمال ۶/۳ ٪ صورت می پذیرد. انرژی آلفای اندرکنش اول برابر با ۱/۴۷۲ MeV و همچنین انرژی آلفای اندرکنش دوم برابر با ۱/۷۷۶ MeV می‌باشد [۶].

در شبیه‌سازی انجام شده در پژوهش حاضر، ماده اصلی سیلیکون است که غلظت‌های مختلفی از ^{10}B به آن افزوده شده است. همچنین چشمه نوترون حرارتی با انرژی ۰/۰۲۵ eV به‌صورت دیسکی و همسوشده تعریف شده است. آشکارساز مورد استفاده از نوع آشکارساز ذرات باردار آلفا (Silicon Surface

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

Barrier) و به شکل استوانه‌ای تعریف گردیده است. چشمه، نمونه و آشکارساز، در یک راستا قرار دارند. نمونه، آشکارساز و چشمه درون محفظه‌ای کروی و در شرایط خلاء قرار گرفته‌اند. با استفاده از تالی F۸ در کد MCNP، طیف ذرات باردار آلفای حاصل از اندرکنش مربوطه در سلول آشکارساز اندازه‌گیری شده است. در شکل ۱ طرح‌واره‌ای از چیدمان طراحی شده برای روش NDP نشان داده شده است.



شکل ۱ : چیدمان آزمایش برای روش NDP.

نمونه‌های موردنظر در این شبیه سازی به صورت ۱۵ لایه تعریف و ضخامت هر یک از این لایه‌ها برابر با ۲ نانومتر (ضخامت کل ۳۰ نانومتر) درنظر گرفته شده است. غلظت ^{10}B در هر یک از نمونه‌ها نیز به‌صورت یک تابع توزیع لجستیک که تحت عنوان Logistic peak شناخته می‌شود، با رابطه ۴ در نظر گرفته شده است:

$$y(x) = y_0 + 4 \cdot A \cdot \exp\left(\frac{-(x-x_c)}{w}\right) \times \frac{1}{\left(1+\exp\left(\frac{-(x-x_c)}{w}\right)\right)^2} \quad (۴)$$

مطابق با تابع توزیع درنظر گرفته‌شده و مسئله مطرح‌شده براساس آن، پارامترهای رابطه فوق به‌صورت زیر معرفی می‌شوند؛ x_c: لایه‌ای که بیشترین غلظت ^{10}B را دارد. w: پهنای کامل در نیمه بیشینه (FWHM) تابع توزیع لجستیک. A: مقدار غلظت بیشینه. y_0: یک مقدار کمینه یا اولیه برای غلظت ^{10}B. x: شماره لایه در نمونه. $y(x)$: مقدار غلظت ^{10}B در لایه شماره x. پارامترهای y_0، A، x_c و w در تابع توزیع رابطه ۴ قابل تنظیم هستند. برای پوشش انواع مختلف توزیع عمقی بور در نمونه، چهار چینش مختلف برای هر پارامتر مطابق جدول ۱ در نظر گرفته شده است.

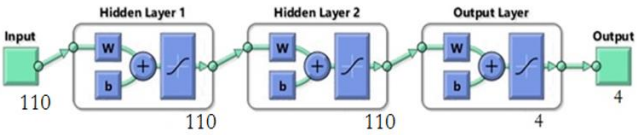
جدول ۱: مقادیر در نظر گرفته شده برای تابع توزیع لجستیک رابطه ۴.

شماره چینش	y_0	A	w	x_c
۱	۱	۳۵	۱	۸
۲	۲	۴۵	۱/۵	۱۲
۳	۳	۵۵	۲	۱۶
۴	۴	۶۵	۳	۲۰

بنابراین $۴^۴$ حالت مختلف، یا به‌طور متناظر $۴^۴$ نمونه (۲۵۶ نمونه) خواهیم داشت که غلظت ^{10}B در لایه‌های مختلف هر یک از این نمونه‌ها، با توجه به تابع توزیع فوق ساخته می‌شود. هر یک از این ۲۵۶ نمونه به‌عنوان یک کد MCNP به‌طور مستقل نوشته‌شده و به ازای تعداد تاریخچه ذرات (NPS) برابر با ۴/۵ میلیارد، ترابرد ذرات در آن انجام شده است. با توجه به NPS درنظر گرفته‌شده، ۱۱۰ نقطه در محدوده قله اول (۱/۴۷۲ MeV) بر روی طیف انرژی آلفا درنظر گرفته‌شده است. همچنین، شبکه عصبی مدنظر، از نوع Feed-Forwarded Back Propagation بوده و روش یادگیری نیز به‌طور پیش‌فرض Levenberg-Marquardt در نظر گرفته شده است.

برای آزمایش شبکه عصبی مصنوعی، دو ماتریس در نظر گرفته شده است. ماتریس input، شامل اطلاعات خروجی تالی F۸ (طیف انرژی آلفا) خواهد بود که دارای ۲۵۶ ستون و ۱۱۰ سطر می‌باشد. ماتریس target نیز شامل ۴ پارامتر درنظر گرفته‌شده برای تابع توزیع لجستیک مد نظر به ازای هر یک از نمونه‌ها می‌باشد و دارای ۴ سطر و ۲۵۶ ستون خواهد بود. درحقیقت شبکه عصبی مصنوعی، پس از یادگیری و درک و تنظیم ارتباط میان ماتریس input و target، می‌تواند ۴ پارامتر تابع توزیع لجستیک را تخمین بزند. پس از این تخمین، با استفاده از آن ۴ پارامتر، می‌توان توزیع عمقی ^{10}B در نمونه را به‌راحتی محاسبه و رسم نمود. در واقع این شبکه با استفاده از اطلاعات تمام ۲۵۶ نمونه Train شده و در ادامه به ارزیابی دقت آن پرداخته شده است. پیکربندی این شبکه عصبی مصنوعی نیز در شکل ۲ نشان داده شده است.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل ۲ : پیکربندی شبکه‌ی عصبی مورد استفاده.

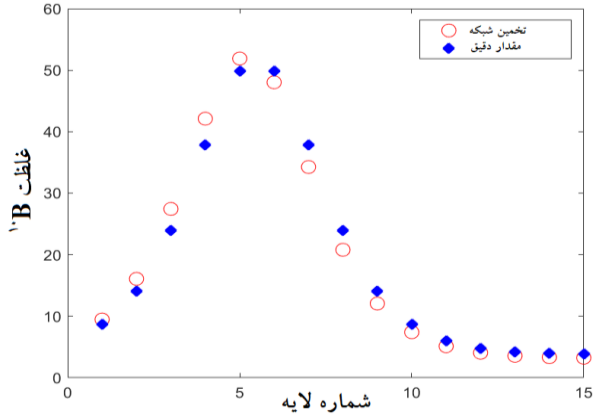
بحث و نتایج

برای ارزیابی دقت شبکه عصبی آموزش داده شده، میانگین اختلاف مطلق در تعیین هر یک از چهار پارامتر تابع توزیع لجستیک در جدول ۲ گزارش شده است.

جدول۲ : میانگین خطای مطلق در تعیین پارامترهای تابع توزیع لجستیک برآورده شده با شبکه عصبی مصنوعی

پارامتر	y_0	A	w	x_c
میانگین اختلاف مطلق	۰/۴۴۰۱	۰/۱۲۳۵	۰/۲۸۱۲	۱/۲۱۳۴

همچنین نمودار توزیع عمقی ^{10}B برای نمونه‌ای با ۱۵ لایه ۲ نانومتری (ضخامت کل ۳۰ نانومتر) در شکل ۳ نشان داده‌شده است. همان‌طور که در شکل ۳ مشخص است، توزیع غلظت عمقی ^{10}B تخمین‌زده‌شده توسط شبکه ANN، تطابق خوبی با مقادیر دقیق پروفایل عمقی ^{10}B داخل نمونه‌های سیلیکونی مورد نظر دارد.



شکل۳ : منحنی تغییرات غلظت بر حسب شماره لایه در ماده نمونه. نقاط آبی رنگ نمایانگر مقادیر دقیق پروفایل عمقی حاصل از تابع توزیع لجستیک و نقاط قرمزرنگ نمایانگر پروفایل عمقی پیش‌بینی‌شده توسط ANN برای نمونه مجهول هستند.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش یک چیدمان آزمایش NDP، با استفاده از کد MCNP شبیه‌سازی گردید و به کمک آن طیف آلفای ناشی از اندرکنش نوترون با ^{10}B برای نمونه‌های موردنظر که شامل توزیعی تصادفی از ^{10}B، براساس تابع توزیع لجستیک تعریف‌شده داخل Si می‌باشند، به‌دست آمد. در طیف آلفای به‌دست آمده از نمونه‌های تولید شده برای یادگیری شبکه عصبی مصنوعی، استفاده شد. پروفایل عمقی ^{10}B با استفاده از شبکه عصبی اندازه‌گیری گردید. بخشی از داده‌ها جهت سنجش اعتبار مدل استفاده گردید. با به‌کارگیری و تحلیل داده‌های طیف آلفا توسط شبکه عصبی، پروفایل عمقی ^{10}B برای تعدادی نمونه مجهول تعیین گردید. نتایج این داده‌ها با پروفایل عمقی به‌دست آمده از نمونه‌های مشخص با یکدیگر مقایسه گردید. نتایج نشان داد مدل پیش‌بینی‌شده توسط شبکه عصبی، تطابق قابل قبولی با پروفایل عمقی ^{10}B حاصل از غلظت‌های نمونه‌های معلوم دارد. همچنین ثابت شد که شبکه‌های عصبی قادر به حل پیچیدگی فرمول‌بندی‌های روش NDP هستند. در نهایت می‌توان ادعا کرد که با بهینه‌سازی پارامترهای مرتبط با شبکه‌های عصبی مصنوعی و یا بهبود تکنیک‌های یادگیری ماشین، روش شبکه عصبی مصنوعی مناسب‌تر از روش‌های مرسوم حل معادلات جهت تعیین غلظت می‌باشد. مطالعات آینده متمرکز بر بهبود پارامترهای مربوط به یادگیری ماشین، غنی‌تر کردن کتاب‌خانه‌های مورد استفاده بر یادگیری ماشین خواهد بود.

مرجع‌ها

[۱] Biersack, J. P., et al. "The use of neutron induced reactions for light element profiling and lattice localization." Nuclear instruments and Methods 149.1-3 (1978): 93-97.
[۲] Weaver, Jamie, and Anna Job. "Adjustment to the Light Element Areal Concentration Calculation for Neutron Depth Profiles." Microscopy and Microanalysis 27.S1 (2021): 2886-2889.
[۳] Downing, R. G., et al. "Neutron depth profiling: overview and description of NIST facilities." Journal of research of the National Institute of Standards and Technology 98.1 (1993): 109.
[۴] Ziegler, J. F., G. W. Cole, and J. E. E. Baglin. "Technique for determining concentration profiles of boron impurities in substrates." Journal of Applied Physics 43.9 (1972): 3809-3815.
[۵] Albarqi, Mubarak, Raed Alsulami, and Joseph Graham. "Automated data processing of neutron depth profiling spectra using an Artificial Neural Network." Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment 953 (2020): 163217.
[۶] Shultis, J. K. "Notes on neutron depth profiling." Engineering Experiment Station Report 298 (2003).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

ترمیم شکست‌های دو رشته‌ای در DNA ناشی از پرتوهای الکترون کم انرژی در فاز G_1 و اوایل S در چرخه سلولی

فرازمند، شهناز[۱]؛ مکاری، مجتبی[۲و*]؛ علامت ساز، محمد حسن[۱]
[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان
[۲] گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی خاتم الانبیاء (ص)، بهبهان

چکیده

مقاله ارائه شده ترمیم شکست‌های دو رشته‌ای (DSB) که از نظر ترمیم سخت‌ترین نوع شکست در DNA هستند را بررسی می‌کند. برای این منظور با کمک شبیه سازی مونت کارلو دوز توسط کد MCNPX در سلول بدست آمده و شکست های ساده و پیچیده ناشی از پرتو الکترون را با کمک کد Geant۴- DNA بدست آورده. این آسیب‌ها می‌توانند ناشی از شکست‌های مستقیم و غیر مستقیم پرتو با DNA باشد. برای از بین بردن سلول‌های سرطانی نیاز است، شکست‌های DSB در DNA ایجاد شود و DNA نتواند خود را ترمیم کند و منجر به مرگ سلول سرطانی شود. در این پژوهش با کمک مدل سازی ریاضی، سینتیک ترمیم DNA و زمان ترمیم به‌دست آمده است. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که در انرژی‌های ۱۰۰ ، ۲۰۰و۳۰۰ الکترون ولت زمان ترمیم افزایش یافته. همچنین برای انواع شکست‌های دو رشته‌ای متوسط زمان ترمیم بدست آمده است.

واژه‌های کلیدی: *آسیب DNA، شکست دو رشته‌ای، ترمیم DNA، الکترون، MCNPX ، Geant۴-DNA*

Repair of double-strand break in DNA induced by low-energy electrons in G_1 and early S phases of the cell cycle

Farazmand, Shahnaz [1]; Mokari, Mojtaba*[2]; Alamatsaz, Mohammad Hasan [1]

[1] Department of Physics, College of Sciences, Isfahan University of Technology, Isfahan
[2] Department of Physics, Behbahan Khatam Alanbia University of Technology, Behbahan

Abstract

The present paper examines the repair of double-strand breaks (DSB), which are the most difficult type of DNA break to repair. For this purpose, with the help of Monte Carlo simulation, the dose in the cell was obtained by the MCNPX code, and the simple and complex damages induced by electrons were obtained with the Geant4-DNA code. These damages can be caused by direct or indirect breaks of the beam with DNA. To kill cancer cells, DSB breaks must be induced in the DNA, and the DNA cannot repair itself which is leading to the death of the cancer cell. In this research, DNA repair kinetics and repair time have been obtained with the help of mathematical modeling. The results of this research show that at energies of 100, 200, and 300 eV, the repair time is increased. Also, the average repair time has been obtained for all types of double-strand breaks.

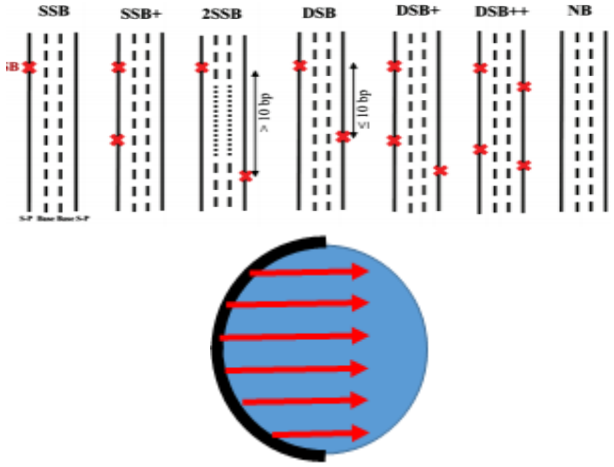
Keywords: DNA damage, double-strand break, DNA repair, electron, MCNPX, Geant4-DNA
PACS No. 20, 87.

۱ . مقدمه

پرتوها به صورت مستقیم و غیرمستقیم بر سلول‌ها اثر می‌گذارند، در برهم‌کنش مستقیم اتم‌های هدف می‌توانند به وسیله یونیزه شدن یا برهم‌کنش کولنی باعث آسیب فیزیکی شوند و در برهم‌کنش غیرمستقیم، چون ۸۰ درصد سلول از آب تشکیل شده است، این پرتوها باعث ایجاد رادیکال‌های آزاد، که مهم‌ترین آنها رادیکال

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

هیدروکسیل (OH°) است، می‌شود. این رادیکال‌ها بخاطر داشتن الکترون آزاد به DNA متصل شده و منجر به شکست DNA می‌شود. آسیب‌های DNA شامل شکست‌های تک رشته‌ای و دو رشته‌ای هستند که در شکل ۱ انواع شکست‌ها نشان داده شده‌اند. انواع مختلف شکست‌های رشته‌ای در DNA شامل شکست‌های ساده SSB, 2SSB, DSB و پیچیده DSB^{++} , DSB^{+}, SSB^{+} هستند، که با توجه به اینکه شکست‌ها چند bp [1] از هم فاصله دارند طبقه بندی می‌شوند. (هر bp برابر ۳/٤ $\dot{A}$ است).



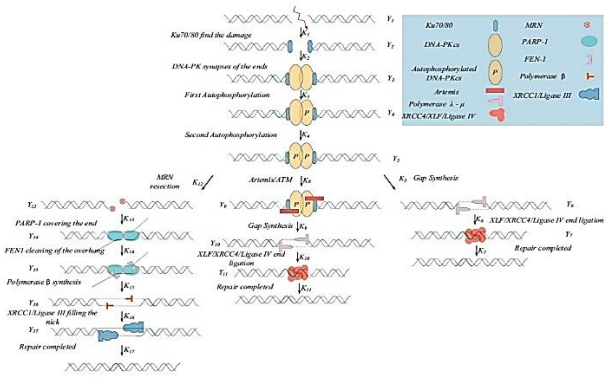
شکل ۱: انواع شکست‌های رشته‌ای DNA (شکل بالا) و محیط کار و چشمه پرتوهای الکترون (شکل پایین)

پس از پرتودهی و شکست DNA بسته به این‌که نوع شکست چگونه باشد، ترمیم DNA انجام می‌شود. گاهی این ترمیم با موفقیت انجام نمی‌شود و باعث مرگ سلول یا جهش ژن‌های DNA می‌شود [۱]. بررسی برهم‌کنش‌های پرتوهای یونساز با ماده و آسیب‌های وارد شده به DNA و محاسبه زمان ترمیم، نقش اصلی در درمان سرطان دارد؛ زیرا در پرتو درمانی سعی در کشتن سلول‌های سرطانی بدون آسیب رساندن به بافت‌های سالم اطراف را داریم. مسیرهای اصلی ترمیم DSB [2](شکست دو رشته‌ای) عبارتند از اتصال انتهای غیرهمولوگ (NHEJ [3])، نوترکیبی همولوگ (HR [4]) و اتصال انتهای با واسطه میکروهوموولوژی(MMEJ [5]) . در میان سه مسیر اصلی ترمیم، NHEJ ساده‌تر و روند ترمیم آن در مقایسه با ترمیم MMEJ و HR سریع‌تر است و در کل چرخه سلولی در رده‌های سلولی پستانداران فعال است [۲-٤] . مسیرهای ترمیم برای انواع آسیب‌ها (پایه و SSB و DSB) تخصصی هستند. ترمیم از مسیر SSB و پایه بسیار ساده و سریع است و تعمیر DSB بسیار دشوار است، و ممکن است ترمیم در مدت زمان زیادی انجام شود. یک فرض اصلی از مدل ترمیم این پژوهش این است که ترمیم سلول بدون در نظر گرفتن نوع آسیب (پیچیده یا ساده) انجام می‌شود. سپس زمان ترمیم در هر مرحله ترمیم محاسبه می‌شود [۵]. تاکنون چندین کار به‌صورت تجربی وشبیه‌سازی برای بررسی آسیب وترمیم DNA پس از پرتودهی انجام شده است. گودهد و همکاران در سال ۱۹۹۳ دریافتند که شکست‌های دو رشته‌ای کندتر از تک رشته‌ای ترمیم می‌شوند؛ لذا احتمال عوارض زیستی بیشتری دارند [٦]. از جمله کارهای تجربی در زمینه آسیب وترمیم DNA، به پژوهش‌های دی لارا و همکاران بر سلول‌های همستر چینی در اثر پرتودهی با اشعه ایکس در سال ۲۰۰۱ می‌توان اشاره کرد [۷]. نیکجو و طالعی و همکارانش شبیه‌سازی‌هایی برای الکترون‌ها و یون‌های سنگین، با کد KURBUC انجام دادند و سرعت واکنش ترمیم برای الکترون‌ها، پروتون‌ها و ذرات He-٤ را با استفاده از مدل ترمیم DSB انجام دادند [۸] . در این پژوهش با کمک کدهای Geant٤-DNA و MCNPX و همچنین حل معادلات ریاضی ترمیم استخراج شده از

[1] Base Pair
[2] Double Strand Break
[3] Non-Homologous End Joining
[4] Homologous Recombination
[5] Microhomology Mediated End-Joining

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

نمودارهای تجربی، میزان ترمیم آسیب‌های دورشته‌ای الکترون‌ها در DNA در فاز G_1 و اوایل S چرخه سلولی، محاسبه می‌شود.



شکل۲: مدل ترمیم DSB در مراحل G_1 و اوایل S چرخه سلولی.

۲. مواد و روش‌ها

برای انجام کار، در محیط کره‌ای از جنس آب معادل هسته سلول و به شعاع ۳ µm، به کمک کد Geant٤-DNA و شبیه‌سازی فیزیکی و شیمیایی الکترون‌ها، توزیع انرژی انباشت پرتوها و مختصات رادیکال‌های هیدروکسیل استخراج و با الگوریتمی با زبان پایتون، آسیب‌های DNA محاسبه شده است. سپس به کمک کد MCNPX به منظور کاهش زمان محاسبات و بالا بردن دقت کار (و به منظور استفاده در روابط ریاضی ترمیم)، مقدار دوز اندازه‌گیری شده و در پایان با استفاده از مدل ریاضی ترمیم، میزان ترمیم آسیب‌های دو رشته‌ای بررسی و محاسبه شده است. در قسمت شبیه‌سازی با کد DNA-٤ Geant الکترون‌ها تا انرژی برش ۷٫٤ eV، با استفاده از مدل اصلی کد، ترابرد شده است. برای کشف کمی جزئیات فرایندهای ترمیم، ما با مدل سازی ریاضی خاصی که از تحلیل نتایج تجربی به‌دست آمده، سرعت واکنش ترمیم شکست دو رشته‌ای را محاسبه کرده‌ایم [۹ – ۱۲]. در این مدل با استفاده از رویکرد دینامیکی، تلاش برای ترمیم DSB با پیدا کردن نوع آسیب، آغاز می‌شود. شکست‌های دو رشته‌ای به سه زیر گروه DSB ساده در یوکروماتین (EC)، DSB ساده در هتروکروماتین(HC) و DSB پیچیده (درHC یا EC) تقسیم می‌شوند (شکل۲ فرایندهای ترمیم متوالی را مرحله به مرحله نشان می‌دهد). در هر سطح، پروتئین خاصی برای ترمیم DSB استفاده می‌شود. فرایندهای پیش سازنده در مرحله ۵ به پایان می‌رسند و بسته به نوع آسیب، DSB با ترمیم DSB ساده (مراحل Y٦ تا Y٧)، ترمیم DSB در هتروکروماتین (مراحل Y٩تا Y١١) و ترمیم پیچیده DSB (مراحل Y١٣ تا Y١٧) انجام می‌شود.

جدول۱: نتایج شکست‌های دو رشته‌ای در DNA که با در نظر گرفتن انرژی آستانه شکست ۱۷٫۵ eV و احتمال آسیب ۰٫۱۳ برای واکنش رادیکال هیدروکسیل (شکست‌های دو رشته‌ای در شکل ۱ نمایش داده شده است).

انرژی	DSB %	DSB^{+} %	DSB^{++} %
۱۰۰ eV	۳/۹۱	۱/۴۲	۰/۱۵
۲۰۰ eV	۶/۷۶	۶/۷۱	۲/۷۸
۳۰۰ eV	۷/۵	۹/۹۵	۷/۴۴

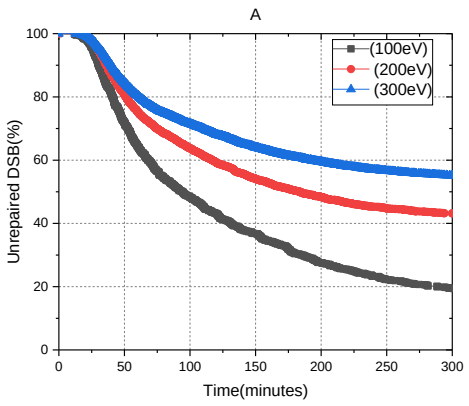
۳. بحث و بررسی نتایج

در این پژوهش برای الکترون‌های ۱۰۰ و۲۰۰ و ۳۰۰ eV با کمک کدهای Geant٤-DNA و MCNPX ، مقدار شکست‌های دورشته‌ای و دوز فیزیکی محاسبه شده است. سپس با حل معادلات ریاضی ترمیم، توابع توزیع احتمال (PDF) وتابع توزیع تجمعی (CDF) فرایندهای تصادفی پروتئین‌های ترمیم محاسبه شد و با کمک تابع توزیع تجمعی، بر حسب این‌که شکست از چه نوعی باشد، زمان ترمیم برای هر شکست به روش نمونه‌گیری تبدیل معکوس (ITS[6]) محاسبه شده است. برای حل معادلات ریاضی، با استفاده از غلظت پروتئین‌های ترمیمی [۱۳]، معادلات را نرمال‌سازی کرده و به صورت عددی به روش رانگ–کوتا مرتبه ٤ حل شده‌است. در ادامه، با استفاده از روش نمونه‌گیری تبدیل معکوس، زمان مورد نیاز برای ترمیم هر مرحله

[6] Inverse Transform Sampling

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

DSB توسط پروتئین مربوطه به آن محاسبه شده و شبیه‌سازی برای انرژی‌های مختلف الکترون انجام شده است [۱۱]. در پایان، متوسط زمان ترمیم DSB ساده، DSB در هتروکروماتین و DSB پیچیده محاسبه شد. DSB ساده در ۴۸ دقیقه، DSBهای ساده در منطقه هتروکروماتین در مدت زمان ۴۰۰ دقیقه و DSBهای پیچیده نیز در ۱۵۱۰ دقیقه ترمیم شده‌اند. این زمان‌ها به نتایج طالعی و همکاران با کد KURBUC [۸] بسیار نزدیک است که دقت انجام پژوهش را در مقایسه با کارهای قبلی نیز نشان می‌دهد. میانگین زمان ترمیم DSB ساده، پیچیده و DSB در هتروکروماتین با تغییر انرژی تابش تقریبا تغییری نمی‌کند. با این حال، نسبت پیچیدگی با تغییر انرژی تابش تغییر می‌کند. DSBهای پیچیده عمدتاً مسئول سرعت واکنش ترمیم کند هستند وتفاوت اصلی برای تابش‌های مختلف، تعداد DSB پیچیده و ساده است. در شکل ۳ درصد DSBهای ترمیم‌شده را بر حسب زمان نشان می‌دهد. ملاحظه می‌کنیم سرعت واکنش ترمیم الکترون‌های ۱۰۰ تا ۳۰۰ eV افزایش یافته است. خطای محاسبات از مرتبه آماری و برای هر انرژی زیر ۵ درصد به‌دست آمده است. نتایج این پژوهش می‌تواند در فرایند درمان سرطان با پرتودرمانی نقش بسیار موثری داشته باشد.



شکل۳: نمودار ترمیم DSB برای الکترون‌های کم انرژی ۱۰۰ تا ۳۰۰ eV

مرجع‌ها

[1] E. B. Podgorsak, “Radiation Oncology Physics: A Handbook for Teachers and Students”, Vienna, International Atomic Energy Agency, 2005.

[2] J.A. Neal, K. Meek, “Choosing the right path: does DNA-PK help make the decision?” Mutat. Res.-Fundam. Mol. Mech. Mut., 711, pp. 73–86, 2011.

[3] L.S. Symington, J. Gautier, “Double-strand break end resection and repair pathway choice”, Annu. Rev. Genet. 45, pp. 247–271, 2011.

[4] A. Shibata, S. Conrad, J. Birraux, V. Geuting, O. Barton, A. Ismail, A. Kakarougkas, K. Meek, G. Taucher-Scholz, M. Lobrich, P.A. Jeggo, “Factors determining DNA double-strand break repair pathway choice in G2 phase”, EMBO J. 30, pp. 1079–1092, 2011.

[5] R. Taleei, P. M. Girard and H. Nikjoo,” DSB repair model for mammalian cells in early S and G1 phases of the cell cycle: application to damage induced by ionizing radiation of different quality” Mutat. Res., 779, pp. 5–14, 2015.

[6] D. T. Goodhead, J. Thacker and R. Cox, “Effects of radiations of different qualities on cells: molecular mechanisms of damage and repair.” *International journal of radiation biology*, 63.5, PP. 543-556, 1993.

[7] C. M. De Lara, M. A. Hill, T. J. Jenner, D. Papworth, P. O’Neill, “Dependence of the yield of DNA double-strand breaks in Chinese hamster V79 - 4 cells on the photon energy of ultra-soft X rays”, Radiation Research, 155, pp. 440–448, 2001.

[8] R. Taleei and H. Nikjoo, “Biochemical DSB-repair model for mammalian cells in G1 and early S phases of the cell cycle “, Mutat. Res. 756 206–12, 2013.

[9] F.A. Cucinotta, J.M. Pluth, J.A. Anderson, J.V. Harper, P. O’Neill, Biochemical kinetics model of DSB repair and induction of gamma-H2AX foci by nonhomologous end joining, Radiat. Res., 169, pp. 214–222, 2008.

[10] F.A. Cucinotta, H. Nikjoo, P. O’Neill, D.T. Goodhead, “Kinetics of DSB rejoining and formation of simple chromosome exchange aberrations”, Int. J. Radiat. Biol., 76, pp. 1463–1474, 2000.

[11] R. Taleei, H. Nikjoo, “The non-homologous end-joining (NHEJ) pathway for the repair of DNA double-strand breaks: I. A mathematical model”, Radiat. Res., 179, pp. 530–539, 2013.

[12] R. Taleei, P.M. Girard, K. Sankaranarayanan, H. Nikjoo, “The non-homologous end-joining (NHEJ) pathway for the repair of DNA double-strand breaks: II. Application to damage induced by ultrasoft X-rays and low energy electrons”, Radiat. Res., 179, pp. 540–548, 2013.

[13] R. Taleei, H. Nikjoo, “The non-homologous end-joining (NHEJ) pathway for the repair of DNA double-strand breaks: I. A mathematical model”, Radiat. Res., 179, pp. 530–539, 2013.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مشخصه یابی ساختاری و الکتریکی لایه نازک اکسیدروی آلایش یافته با نیتروژن در پیوند نامتجانس p-N:ZnO/n-Si

تاج بخش، نیلوفر [۱] ؛ دژم ، لعیا[۲] ؛ الهی ، سید محمد[۱]

۱ گروه فیزیک ، واحد علوم و تحقیقات، دانشگاه آزاد اسلامی ، تهران، ایران

۲گروه فیزیک، واحد تهران غرب، دانشگاه آزاد اسلامی ، تهران، ایران

چکیده

در این تحقیق ، به بررسی خواص ساختاری، ریخت شناسی سطح، توزیع ذرات، خواص نشر تابشی و خواص الکتریکی پیوند نامتجانس p-NZO/n-Si به عنوان یک دیود پیشنهادی برای سلولهای خورشیدی پرداخته شده است . لایه نازک اکسیدروی با ناخالصی نیتروژن بر روی زیر لایه‌های سیلیکونی نوع n توسط سیستم کندوپاش مغناطیسی RF رشد داده شد و سپس تحت جریان گاز نیتروژن در چهار دمای متفاوت۳۰۰ و ۴۰۰ و ۵۰۰ و ۶۰۰ درجه سلسیوس تحت بازپخت قرار گرفت و به آرامی در دمای اتاق سرد شد. ثابت شبکه c با افزایش دمای بازپخت افزایش و وجود ناخالصی نیتروژن را مشخص نمود و تغییرات انرژی گاف نواری با افزایش دمای بازپخت از ۳.۲ eV تا ۳.۳ افزایش یافت. بررسی خواص الکتریکی آنالیز I-V مقادیر جریان مدار کوتاه، فاکتور ایده آل دیود،ارتفاع سد پتانسیل و مقاومت سری محاسبه گردید.بیشینه ولتاژ-جریان باز برای نمونه بازپخت شده در ۵۰۰ درجه سلسیوس است که نمودار I-V نیز رفتار دیودی آن را نشان می‌دهد.

واژه های کلیدی: *لایه‌های نازک اکسیدروی با ناخالصی نیتروژن (NZO) ، پیوند نامتجانس p-NZO/n-Si ، سیستم کندوپاش مغناطیسی RF*

Study of physical properties of heterojunction Si-n/N:ZnO-p

Tajbakhsh, Niloofar[1] ; Dejam, Laya[2] ; Elahi, S.M[1]

[1] Department of Physics, Science and Research branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran
[2] Department of Physics, West Tehran branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran

Abstract

In this research, the structural properties, surface morphology, particle distribution, emission properties and electrical properties of p-NZO/n-Si hetrojunction as a proposed diode for solar cells have been investigated. Thin films of zinc oxide with Nitrogen doped were grown on silicon substrates create by the RF magnetron sputtering system and then annealed under flow of nitrogen gas at four different temperatures of 300, 400, 500 and 600 ° C and then slowly after annealing. The lattice c constant increased with increasing annealing temperature and the presence of nitrogen impurities and the band gap energy changes increased with increasing annealing temperature from 3.2 to 3.3 eV. Investigation of electrical properties of I-V analysis short circuit current values, ideality diode factor, and potential barrier height and series resistance were calculated. The electrical properties, I-V analysis was performed the maximum open current voltage for the annealing sample is 500 ° C, which I-V diagram also shows its diode behavior.

Keywords:
Zinc oxide thin films with nitrogen impurities, p-NZO / n-Si heterojunction, RF magnetron sputtering system, diode

PACS No. 68

مقدمه

اکسیدروی به دلیل شکاف باند پهن، شفافیت بالا در محدوده مرئی و رسانایی الکتریکی خوب، جایگاه منحصر به فردی در میان سایر مواد نیمه رسانا دارد[۱]. بررسی لایه نازک اکسیدروی نوع p به دلیل مشکلاتی مانند نقص های دهنده ذاتی، سطح پذیرنده عمیق و حلالیت کم آلاینده های نوع p همراه هستند. در میان ناخالصی‌های گروه پنج (نیتروژن،فسفر،آرسنیک) ،آلایش نیتروژن به دلیل شباهت شعاع یونی بین نیتروژن ۱.۶۸ A° و اکسیژن ۱.۳۸ A° (فقط ۲۲٪ بزرگتر از اکسیژن) اکسیدروی نوع p را تشکیل می‌دهد[۲]. این لایه‌های نازک بوسیله روشهای مختلفی از جمله : تبخیر ، رسوب

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

لیزر پالس ، کندوپاش مغناطیسی و ...تهیه شده‌اند و روش کندوپاش مغناطیسی به دلایل چسبندگی قوی، تکرار پذیری، یکنواختی و...قابل توجه است[۱]. در این تحقیق، لایه های نازک اکسیدروی با ناخالصی نیتروژن بر روی زیرلایه‌های سیلیکونی با هدف ایجاد یک پیوند نامتجانس(p-NZO/n-Si) توسط سیستم کندوپاش مغناطیسی RF رشد داده شدند و سپس در شار گاز نیتروژن در چهار دمای متفاوت تحت بازپخت قرار گرفتند. هدف بررسی این اتصال به عنوان یک پیوند نامتجانس پیشنهادی، مناسب برای دیودهای سلول خورشیدی می‌باشد .

۲. مراحل تجربی

لایه‌های نازک اکسیدروی آلایش یافته با نیتروژن بوسیله دستگاه کندوپاش مغناطیسی RF مدل (MSS160) رشد داده شد که نمونه ها با توان و زمان کندوپاش ۱۳۵ وات و ٦۰ دقیقه، فشار کاری و فشار پایه به ترتیب$^{-3}$۱۰×٦.۵ و $^{-4}$۱۰×۱.٤ میلی‌بار، گاز کندوپاش ۳۰درصد نیتروژن و ۷۰درصد آرگون در شرایط یکسان لایه‌نشانی، آماده شدند . ضخامت نمونه‌ها ۳۰۰ نانومتر بدست آمد و سپس به منظور پایداری و ثبات لایه هایNZO ، در چهار دمای متفاوت ٦۰۰-۵۰۰-٤۰۰-۳۰۰ درجه سلسیوس به مدت یک ساعت در جریان گاز نیتروژن داخل کوره تحت بازپخت قرار گرفتند و به آرامی به دمای اتاق رسیدند. از سیلیکون نوع n در ابعاد cm ۱×۲ و هدف اکسیدروی استفاده شد. الگوی پراش پرتو ایکس(XRD) توسط دستگاه مدل Philips PW3710 با چشمه Cu-Kα و طول موج $\lambda = ۰.۱۵٤nm$ انجام شد، بررسی اندازه متوسط، نحوه توزیع دانه‌ها و تغییرات آنها تحت تاثیر بازپخت از میکرسکوپ نیروی اتمی Park Scientific Instruments-Cp Auto Probe (contact mode) از میکروسکوپ الکترونی روبشی مدل MIRA3 TESCAN استفاده شد. بررسی طیف نشری لایه‌ها توسط دستگاه Cary Eclipse spectrometer انجام شد.مشخصه جریان – ولتاژ در تاریکی و روشنایی بوسیله دستگاه (SIM-1030) در پژوهشگاه انرژی خورشیدی دانشگاه شریف انجام شد.

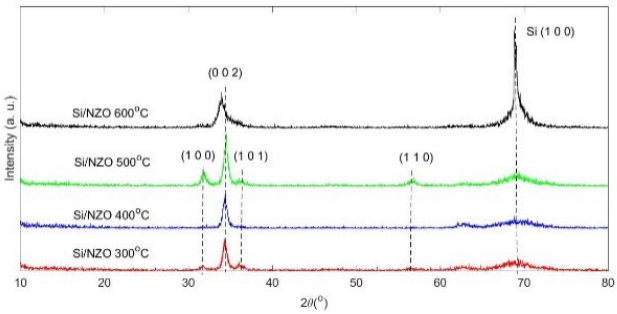
۳. نتایج و بحث

۳. ۱. بررسی ساختار و مورفولوژی

به منظور مشاهده طرح پراش نمونه های اکسیدروی آلایش یافته با نیتروژن روی زیر لایه سیلیکون و بازپخت شده در دماهای°C ۳۰۰ ، ٤۰۰ °C ، ۵۰۰°C ، ٦۰۰ °C به ترتیب در شکل ۱ نشان داده شده است. ساختار بلوری NZO هگزاگونال مطابق با PDF کارت شماره ۱۱۳٦-۰۰۱-۰۰ در همه نمونه ها مشخص گردید. یک پیک در (۰ ۰ ۲) در تمام طرح ها مشاهده می‌شود و دو پیک خیلی کوچک در ۲θ نزدیک به° ۳۱.۷٦ و ° ۳٦.۲۵ در نمونه ۵۰۰°C و ۳۰۰°C مشاهده می شوند. که وابسته به پراش صفحات (۰ ۰ ۱) و (۱ ۰ ۱) اکسیدروی به ترتیب می باشد که نشان دهنده آن است که همه لایه های اکسیدروی آلاییده شده با نیتروژن کیفیت بلوری خوبی با جهت ترجیحی (۰ ۰ ۲) دارند هیچ فاز دیگری (برای مثال Zn_3N_2)یافت نشده است. جدول ۱ مقادیر پهنا در نصف مقدار بیشینه (FWHM) ، ۲θ ، ثابت شبکه محور-c (c) برای لایه های اکسیدروی آلاییده شده با نیتروژن بازپخت شده در دماهای متفاوت را نشان می‌دهد. در غلظت های با آلایش نیتروژن کمتر جهت ترجیحی (۰۰۲) شدت بیشتری دارند و صفحات (۱۰۰) و(۱۰۱) شدت کمتری پیدا می کنند[۲].در دمای بازپخت ۵۰۰°C که صفحات بلوری (۱۰۰) و(۱۰۱) ظاهر شده است نشان از غلظت بیشتر نیتروژن در لایه و قرار گرفتن نیتروژن بیشتر در ساختار اکسیدروی دارد. وجود صفحات بلوری (۱۰۰) و(۱۰۱) نشان از نقص های تهی جا اکسیژن و اتم های بینابینی Zn است که احتمال حضور نیتروژن را بالاتر برده است اما با افزایش دما تنها صفحه بلوری (۰۰۲) مشاهده شده است. این پیک به سمت ۲θ کمتر نسبت به اکسیدروی خالص ($۲\theta = ۳٤.٤°$) جابه جا شده است که دلیل آن می تواند مربوط به شعاع اتمی نیتروژن باشد که بزرگتر از اکسیژن است، پس حدس زده میشود که نیتروژن به جای اکسیژن جایگزین شده است. اما در نمونه بازپخت شده در ۵۰۰ درجه ۲θ نسبت به ساختار اکسیدروی خالص به سمت زوایای بزرگتر جابه جا شده که حدس زده می شود به دلیل وجود اتمهای بینابینی Zn ، اتمهای نیتروژن به جای Zn در ساختار لایه قرار گرفته است. تصاویرآنالیز AFM (شکل۲ الف، ب)،تغییرات توزیع اندازه ذرات

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

و دانه‌ها را نشان می دهد. دلیل افزایش اندازه دانه‌ها مربوط به پخش شدگی سطحی و چسبیدن ذرات به یکدیگر است [۳] با بازپخت در ۵۰۰ درجه سلسیوس توزیع ذرات با افزایش اندازه دانه ها همراه است .که دقیقا با آنالیز XRD نیز این نتایج تایید شد و اندازه های بلورک نمونه های ۵۰۰ درجه سلسیوس بزرگتر از همه نمونه ها بدست آمد. زبری نمونه در جدول ۱ نیز مشخص میکند که با افزایش دمای بازپخت سطح لایه ها نرم تر و در اثر گرما زبری کمتر شده و ذرات به هم چسبیده تر شده اند.



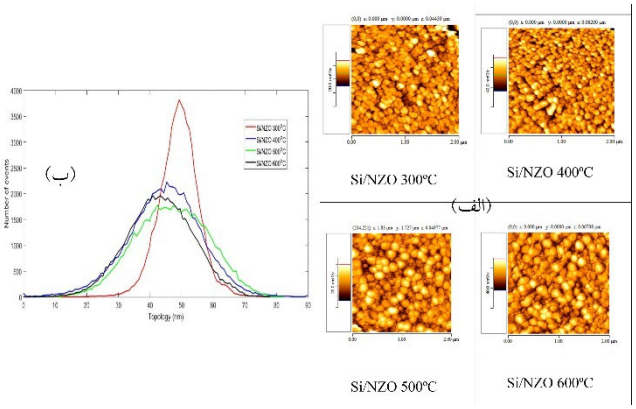
شکل ۱:طرح پراش اشعه ایکس لایه های نازک NZO بر روی زیرلایه های سیلیکون و بازپخت آنها در دماهای مختلف

جدول ۱:مشخصات ساختاری لایه های NZO

sample	2 θ (°)	c (Å)	Crystallite size (nm)	Lattice strain (%)	RMS Roughness	$E_{g(emission)}$ (eV)
۳۰۰°C	۳٤.۳۲۹۷	۵.۲۲	۱۵.۱	۰.۷۷۸	۱۱.۱۸	۳.۳۲٤
٤۰۰°C	۳٤.۳۰۵۰	۵.۲۳	۱۰.۸	۱.۰۸٦	۱۰.۸٦	۳.۳۲۸
۵۰۰°C	۳٤.۵٤٤٦	۵.۲۰	۷۰.٤	۰.۱٦٦	۱۰.۷٦	۳.۳۳۳
٦۰۰°C	۳۳.۹٤۱۰	۵.۲۹	۱۳.۲	۰.۹۰۰	۹.۹٤	۳.۳۳۷

۳. ۲. بررسی خواص نشر تابشی

بررسی خصوصیات نشر تابشی لایه NZO شکل۳ با طول موج تحریکی ۳۲۰ نانومتر لامپ زنون انجام شد. چهار پیک نشری مربوط به فرابنفش، بنفش ،آبی و سبز در طیف ها مشاهده شد. نشر فرابنفش مربوط(NBE(Near Band Edge و مابقی جزء دسته DLE (Deep Level Emission) می‌باشند.گسیل فرابنفش در حدود ۳۹۵ تا ٤۰۰ نانومتر نشر نزدیک به لبه نواری است که از بازترکیب اکسایتون آزاد در اکسیدروی به وجود می آید. اگر حفره های ذاتی لایه فرابنفش ،کمتر باشد غلظت اکسایتون آن محدود می‌شود و منجر به پیک فرابنفش کمتر می‌شود. حال اگر یک یون در ساختار بلوری اکسیدروی به جای یک یون اکسیژن قرارگیرد، آنگاه یون نیتروژن به عنوان گیرنده در لایه اکسیدروی عمل می کند و بنابراین دارای حفره ها و اکسایتون های زیادتر میشود که الکترون‌ها به‌دلیل کوتاه‌تر بودن مسیر آزاد متوسط و نیروی کولن بر اساس اثر محصور شدن کوانتومی، می‌توانند آن را به راحتی در سطح مشترک ایجاد کنند. در نمونه بازپخت شده در ۵۰۰ درجه به دلیل ساختار بلوری و بیشترین شدت طیف PL مشاهده می شود[۳]. شدت طیفPL نشان دهنده نسبی نوارهای مرئی برای تراکم نقص های لایه های NZO شناخته می شود .نشر نوار بنفش دو پیک در حدود ٤۲۰ و ٤۰۲ نانومتر را نشان می‌دهد که به انتشار نقص جای خالی Zn (V_{Zn}) که مرتبط با وضعیت پذیرنده عمیق تر V_{Zn} می باشد که معمولاً به عنوان نقص غالب در پاسخ به رسانایی نوع p لایه NZO در نظر گرفته می شود. یک پیک غالب واقع در ٤۸۷ نانومتر، به عنوان انتشار در سطح عمیق شناخته می شود که می تواند به نقص های مربوط به اکسیژن اختصاص داده شود. با افزایش دمای بازپخت، شدت طیف‌ها افزایش یافته، که افزایش چگالی ترازها را نشان می دهد [۲].



شکل۲ : الف- تصاویر دو بعدی و ب-توزیع اندازه ذرات لایه NZO بازپخت شده و بدون بازپخت

۳. ۳. بررسی خواص الکتریکی

شکل ٤ ویژگی های I-V را برای اتصال Si-n/NZO-p و طرح کلی نمودار آن را نشان می دهد.ویژگی‌های I-V دیود شاتکی را با استفاده از تئوری انتشار حرارتی ، که در آن پارامترهای تجربی دیود شاتکی، مانند ضریب ایده‌آل و ارتفاع سد پتانسیل را محاسبه نمودیم. رابطه I-V توسط[٤]

$$I \approx I_0 \left(\exp\left(\frac{q(V-IR_S)}{nK_BT}\right)\right) \qquad (۱)$$

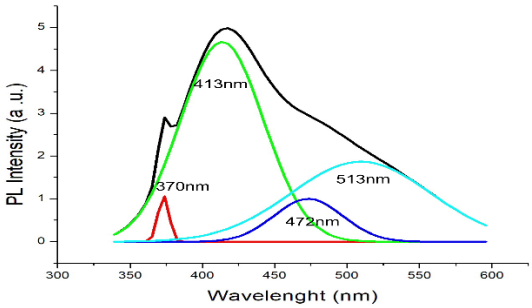
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$$I_0 = AA^*T^2\exp\left(-q\varphi_B/K_BT\right) \quad (۲)$$

که I_0 جریان اشباع دیود، q بار الکتریکی، A* (32 cm^2 K^2) ثابت ریچاردسون، A مساحت دیود، V ولتاژ اعمالی، φ_B ارتفاع سد موثر، n ضریب ایده آل و K_B ثابت بولتزمن است. ضریب ایده آل با استفاده از شیب ناحیه خطی مشخصه های I-V با استفاده از رابطه :

$$n = (q/kT)(dV/d\ln(I)) \quad (۳)$$

اندازه گیری می شود و مقدار آن بین ۱.۱۳ تا ۳.٤٦ به دست آمد. فاصله ضریب n از مقدار ایده‌آل ۱، به وجود لایه سطحی بین فلز و نیمه‌رسانا، مکانیسم‌های رسانش جریان به غیر از انتشار گرمایی، مانند تونل‌زنی، بازترکیب و غیره و یا وجود سد ناهمگن را نشان می‌دهد[٤] ارتفاع سد موثر اتصال شاتکی φ_B نزدیک ۰.۳ eV برای همه نمونه ها بدست آمد.



شکل۳ : طیف PL لایه‌های نازک NZO بازپخت شده در ۵۰۰ درجه سلسیوس

لازم به ذکر است که پارامترهای تجربی دیود شاتکی با استفاده از مدل انتشار ترمیونی، از ناحیه ولتاژ پایین (منطقه خطی) ویژگی‌های جریان–ولتاژ بدون در نظر گرفتن اثر مقاومت سری محاسبه شدند. روابط Cheung [٤] به ترتیب:

$$\frac{dV}{d(LnI)} = \frac{nKT}{q} + IR_s \quad (٤)$$

$$H(I) = V - \frac{nKT}{q}Ln\left(\frac{1}{A\,A^*T^2}\right) \quad (٥)$$

$$H(I) = n\varphi_B + IR_s \quad (٦)$$

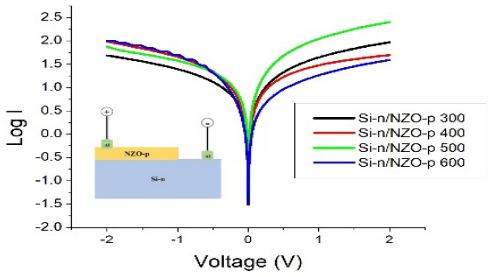
مقاومت سری از شیب منحنی dv/d(ln I) به دست آمده (جدول ۳) که محور Y از منحنی H(I) در مقابل I ارتفاع سد مطابق با رابطه (٦) به دست می آید. تفاوت نسبی بین مقدار ارتفاع سد به‌دست‌آمده از مدل انتشار ترمیونی و روش Cheung مقاومت سری و حالت‌های رابط در فلز و نیمه‌رسانا را نشان می دهد.

نتیجه گیری

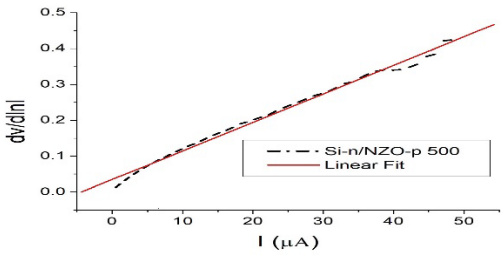
خواص ساختاری ، اپتیکی و الکتریکی پیوند نامتجانس p-NZO/n-Si که به روش کندوپاش مغناطیسی RF تهیه و سپس در دماهای مختلف در گاز نیتروژن بازپخت شد، به عنوان یک پیوند نامتجانس دیودی برای سلولهای خورشیدی مشخص شد. ثابت شبکه c با افزایش دما افزایش یافت، بررسی خواص الکتریکی آنالیز I-V نشان داد، بیشینه جریان کوتاه برای نمونه بازپخت شده در ۵۰۰ درجه سلسیوس است که نمودار I-V نیز رفتار دیودی آن را نشان داد و کمینه مقاومت سری نیز برای آن نمونه مشخص شد.

جدول۳: نتایج محاسبات آنالیز جریان–ولتاژ

نمونه	$(\mu A)I_{SC}$	n	φ_B(eV)	R_s
۳۰۰ °C	۰.۳۱۲	۱.۱۳	۰.۳۱۳	۲.۰٦
٤۰۰ °C	۰.۳۳۳	۳.٤٦	۰.۲٦٦	٤.۲۳
۵۰۰ °C	۰.۵۱٤	۱.۲۳	۰.۳۰۸	۰.٦۷
٦۰۰ °C	۰.۱۸۵	۳.۰۱	۰.۳۲٦	٤.٦۱



شکل٤ : نمودار جریان–ولتاژ لایه های نازک NZO بازپخت شده در دماهای مختلف



شکل ۵ : نمودار dv/dlnI برحسب جریان

مراجع

[۱] S. Talu, M. Bramowicz, S. Kulesza ,Sh. Solaymani, A. Ghaderi, L. Dejam, S. M. Elahi , A. Boochani;"Microstructure and micromorphology of ZnO thin films: Case study on Al doping and annealing effects", *Superlattices and Microstructures* **93** (2016) 109-121
[۲] Zi-Neng, K. Chan, Sh. Muslimin, D. Knipp;" P-Type Characteristic of Nitrogen-Doped ZnO Films", *Journal of ELECTRONIC MATERIALS*, **47** (2018) 5607–5613.
[۳] Laya Dejam, S. M. Elahi, H. Honarvar Nazari, H. Elahi, Sh. Solaymani, A. Ghaderi;" Structural and optical characterization of ZnO and AZO thin films: the influence of post-annealing", *J Mater Sci: Mater Electron* **27** (2016), 685-696
[٤] L. Rajan, C. Periasamy, V. Sahula;" Electrical characterization of Au/ZnO thin film Schottky diode on silicon substrate", *Perspectives in Science* **8**, (2016), 66-68

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

شبیه‌سازی سه‌بعدی فراعدسی کروی دوکانونه با بازدهی کانون بالا

مومنی، فاطمه[1]؛ بازوبند، فاطمه[1]؛ هاشمی، مهدیه[1]

[1]گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه فسا، ایران

چکیده

در این مقاله یک فراعدسی کروی دی‌الکتریک دو کانونه در طول موج 700 نانومتر با بازدهی کانون بالا به‌صورت سه بعدی طراحی و شبیه‌سازی شده‌است. برای شبیه‌سازی این فراعدسی کروی از فراتم‌های سیلیکونی (SiO_2) و صلیبی شکل استفاده شده که روی زیرلایه‌ای از جنس سیلیکا (Si) قرار گرفته‌اند. ساختار صلیبی شکل فراتم‌های انتخابی برای طراحی فراعدسی موردنظر به گونه‌ای است که همزمان مولفه x و مولفه y تابش ورودی با قطبش خطی 45^0 را استفاده کرده و هرکدام را درمحلی دلخواه کانونی می‌کند. بازدهی کانون‌های ایجاد شده بیش از 90٪ می‌باشد که با انداختن دوکانون روی هم شدت بیشینه کانون تا حدود 50٪ افزایش می‌یابد. به واسطه شبیه‌سازی سه بعدی انجام گرفته، نمایش عرضی کانون‌های ایجاد شده برای محاسبه حدپراش نیز به‌خوبی امکان پذیر می‌باشد.

واژه های کلیدی: *فراعدسی کروی دوکانونه، فراتم‌های صلیبی شکل، بازدهی کانون، حد پراش.*

3D Simulation of Spherical Bifocal Metalens with High Focusing Effeciency

Momeni, Fatemeh[1]; Bazouband, Fatemeh[1] ; Hashemi, Mahdieh[1]

[1] Department of Physics, College of Science, Fasa University, Fasa 74617-81189, Iran

Abstract

In this article, a dielectric spherical bifocal metalens at a wavelength of 700 nm with high focal efficiency has been designed and simulated in three dimensions. To simulate this spherical metalens, silicon (SiO2) and cross-shaped meta-atoms are used, which are placed on a silica (Si) substrate. The cross-shaped structure of selected meta-atoms are such that they use x- and the y-components of the initial radiation with a linear polarization of 45^0 and each one focuses in the desired places simultaneously. The efficiency of the created focal spots are more than 90% and when they overlap to a single focal spot, the maximum field intensity increases about 50%. Due to 3D simulation, the transvers presentation of focal spots is possible to calculate the diffraction limit.
***Keywords**: Spherical bifocal metalens, cross-shaped meta-atoms, 3D simulation, focusing efficiency, diffraction limit.*

PACS No.

مقدمه

فراعدسی‌ها اخیرا به علت شکل و اندازه‌ی کوچک و قابلیت‌های بسیار، توجه زیادی به خود جلب کرده‌اند. هدف اصلی از جایگزینی عدسی‌های معمولی با فراعدسی‌ها این است که به یک ساختار کوچک و فشرده نسبت به طول موج کاری دست یافت. فراعدسی‌ها متشکل از فراتم‌ها هستند که ابعاد و ارتفاع کوچک‌تر از طول موج کاری دارند. نحوه چیدمان فراتم‌ها در یک سطح به کاربرد و ملاحظات فاز و دامنه بستگی دارد. می‌توان بازده فراعدسی‌ها را با انتخاب هوشمندانه فاز برای فراتم‌ها افزایش داد. در طراحی فراعدسی کروی شرط فازی برای هر نقطه روی فراماده به‌منظور متمرکزسازی و یا رخ دادن تداخل سازنده در ناحیه و فاصله‌ی انتخاب‌شده به‌عنوان کانون باید فراهم باشد[1]. فراعدسی کروی نور را در یک نقطه کانونی می‌کند که این امر موجب می‌شود شدت کانون ایجاد شده در این نوع عدسی از شدت کانون

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

ایجاد شده در عدسی استوانه‌ای [2] که نور را روی یک خط کانونی می‌کند، بیشتر باشد. در مرجع [3] فراعدسی کروی دوکانونه شبیه‌سازی شده که با ترکیب فاز هندسی و فاز انتشار معادله‌ی فاز فراعدسی دوکانونی حاصل شده است. این فراعدسی تحت قطبش دایروی قرار گرفته و با توجه به قطبش راست‌گرد یا چپ‌گرد نور فرودی موجب متمرکز شدن نور در یک یا دو محل شده است. فراعدسی‌ها می‌توانند کاربردهای گسترده‌ای در میکروسکوپ لیزری، تصویربرداری و طیف سنجی داشته باشند. تصویربرداری با وضوح بالا به عدسی‌هایی با روزنه عددی بالا نیاز دارد که حجیم و گران هستند. فراعدسی‌ها به علت اینکه در ابعاد نانومتری و کمتر از طول موج کاری هستند می‌توانند بزرگ نمایی را تا حدی زیادی بهبود ببخشند. در مرجع [4] فراسطوحی با جنس دی اکسید تیتانیوم برای ساخت فراعدسی کروی با روزنه عددی بالا در طول موج‌های مرئی استفاده شده است.

در این مقاله برای اولین بار فراعدسی کروی دوکانونه با استفاده از فراتم‌های صلیبی شکل و سیلیکونی در طول موج 700nm در سه‌بعد طراحی و شبیه‌سازی شده است که وقتی تحت تابش نور فرودی با قطبش خطی 45° قرار می‌گیرد می‌تواند نور را در دو نقطه‌ی مجزا کانونی کند.

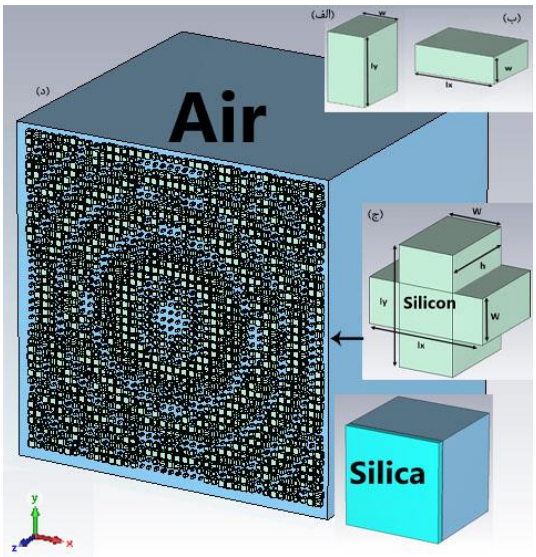
طراحی ساختار

فراتم‌های صلیبی شکلی که در این مقاله برای طراحی فراعدسی استفاده می‌شوند، از روی هم قرار گرفتن فراتم‌های مکعب مستطیل شکل ساخته می‌شوند که از جنس سیلیکون هستند و ابعادشان (طول و عرض و ارتفاع آن‌ها یعنی lx,ly,w) در محدوده‌ی طول موج نور است، شکل 1 الف-ج. هر کدام از فراتم‌های صلیبی شکل وقتی تحت تابش قطبش خطی x و y قرار بگیرند، دامنه و فاز مشخصی خواهند داشت که با تغییر ابعاد آن‌ها می‌توان دامنه و فاز آن‌ها را تغییر داد. فرآیند تغییر ساختار و محاسبه دامنه و فاز نور عبوری از فراتم، سوئیپ نام دارد. در این مقاله از 22000 فراتم صلیبی شکل سوئیپ گرفته شد. به ازای lx,ly,w های مختلف با تفاوت‌های 3nm یکبار قطبش خطی x و یکبار قطبش خطی y تابیده شد و دامنه و فاز نور عبوری استخراج شد. محدوده‌ی تغییر ابعاد فراتم بدین گونه است: 90nm < lx < 350nm و 100nm < ly < 360nm و w=90, 180 & 270nm و h=200 nm.

برای طراحی فراعدسی کروی مورد نظر در این مقاله از میان 22000 فراتم صلیبی شکل که دامنه و فاز آن‌ها مشخص شد، فراتم‌هایی باید انتخاب شوند که پروفایل فازی فراعدسی کروی را فراهم بسازند. این پروفایل فازی در رابطه (1) برای فراعدسی کروی بیان شده است.

$$\varphi(x,y)=\frac{2\pi}{\lambda}\left[\sqrt{x^2+y^2+f^2}-f\right] \qquad (1)$$

در رابطه (1)، f فاصله نقطه کانونی از فراعدسی، λ طول موج در محیط انتخابی جهت کانونی کردن نور و x و y مختصات فراتم‌ها روی صفحه زیر لایه می‌باشد.



شکل 1. نمایی از الف) و ب) فراتم‌های مکعب مستطیل شکل. ج) فراتم صلیبی شکل. د) فراعدسی کروی.

شبیه‌سازی

در شبیه‌سازی فراعدسی کروی مورد نظر 1600 فراتم صلیبی شکل در صفحه‌ی x و y از محدوده‌ی 19d- تا 19d روی زیرلایه‌ای از جنس سیلیکا چیده شدند، مطابق شکل 1 د. d فاصله‌ی مرکز تا مرکز فراتم‌ها است و مقدار آن برابر با 360nm است. نور با قطبش 45° از سمت سیلیکا تابیده می‌شود از فراتم‌ها عبور می‌کند و در هوا کانونی می‌شود.. شبیه‌سازی در محیط CST انجام شده و از شرط مرزی باز در راستای x و y و z استفاده شده است.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

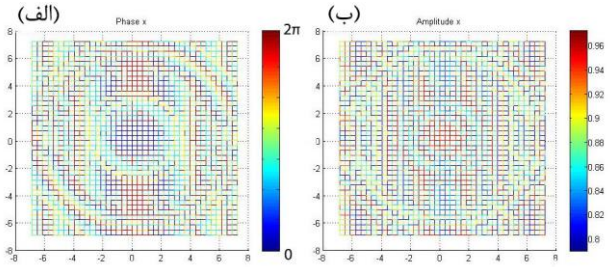
همان‌طور که در بخش قبل گفته شد هر کدام از فرااتم‌ها وقتی تحت تابش قطبش x یا y قرار می‌گیرند فاز و دامنه مشخصی خواهند داشت. زمانی که فرااتم‌ها تحت تابش قطبش 45^o قرار بگیرند فرااتم‌ها می‌توانند هم مولفه x و هم مولفه y این قطبش را به طور مجزا استفاده کنند. برای طراحی فراعدسی دو کانونه رابطه-های فازی (2) و (3) برای مولفه x و y قطبش باید همزمان برقرار باشند.

$$\varphi_x(x,y) = \frac{2\pi}{\lambda}\left[\sqrt{x^2+y^2+{f_x}^2} - f_x\right] \qquad (2)$$

$$\varphi_y(x,y) = \frac{2\pi}{\lambda}\left[\sqrt{x^2+y^2+{f_y}^2} - f_y\right] \qquad (3)$$

f_x و f_y به ترتیب فاصله‌ی نقاط کانونی تا فرااتم‌ها که بر روی محور x چیده شده‌اند برای مولفه x و y تابش فرودی است. هنگامی که f_x و f_y یکسان در نظر گرفته شود، کانون‌های دو قطبش روی یک‌دیگر تشکیل شده و شدت کانون ایجاد شده بیشتر می-شود.

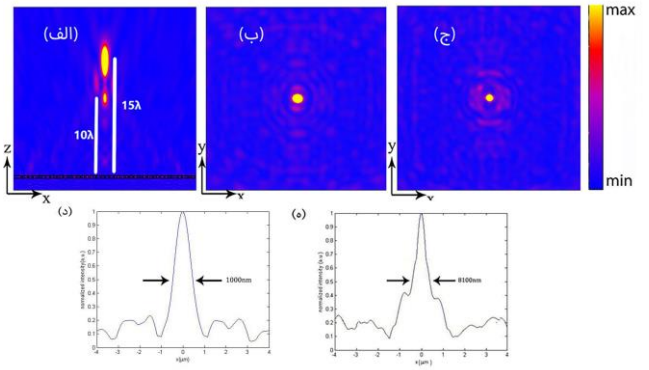
در شکل 2 دامنه و فاز فرااتم‌های انتخاب شده در صفحه x و y نشان داده شده است. فرااتم‌های انتخاب شده باید محدوده‌ی فازی 0 تا 2π را پوشش دهند، با توجه به شکل 5، الف این امر تحقق یافته است و همچنین با توجه به قسمت ب دامنه‌ی فرااتم‌های انتخاب شده بین 0.8 تا 1 است که این نشان دهنده آن است که فرااتم‌های انتخابی از بازدهی بالایی برخوردارند.



شکل 2. فاز و دامنه فرااتم‌های انتخاب شده برای طراحی فراعدسی کروی.

پس از انتخاب فرااتم‌ها بوسیله کدی که در متلب برای انتخاب بهترین فرااتم‌ها بر اساس رابطه فازی مورد نیاز نوشته شده، به چیدمان آن‌ها برای طراحی فراعدسی کروی در نرم‌افزار شبیه‌سازی CST پرداخته و با تابش نور فرودی با قطبش خطی 45^o درجه از زیرلایه سیلیکا به فرااتم‌های سیلیکونی به شبیه‌سازی ساختار و بررسی کانون‌های تشکیل شده پرداخته شد.

ابتدا فرااتم‌ها را به گونه‌ای انتخاب شدند که مولفه‌های x و y تابش فرودی کانون‌هایی در مکان‌های مجزا و دور از هم داشته باشند تا فراعدسی دوکانونه داشته باشیم. در شکل 3 نتیجه شبیه‌سازی چنین عدسی آورده شده است. در شکل 3 الف با انتخاب $f_x=15\lambda$ و $f_y=10\lambda$ توزیع میدان روی صفحه‌ی x و z نمایش داده شده است. همان‌طور که انتظار می‌رود دو کانون در محل مورد نظر تشکیل شده‌اند و به خوبی نمایان است. در قسمت ب و ج توزیع میدان روی صفحه‌ی عرضی x و y نشان داده شده است. کانون تشکیل شده در محل $f_x=15\lambda$ دارای بازده‌ی کانون 97% است و کانون در محل $f_y=10\lambda$ بازده‌ی کانون 96% دارد. بازدهی کانون به‌صورت شدت میدان عبوری از دایره‌ای اطراف کانون با شعاعی سه برابر *FWHM*[1] نسبت به شدت میدان کل تعریف می‌شود [3]. مقدار حد پراش که همان اندازه کمینه کانون است در شکل 3 ب 1000nm و در شکل 3 ج 8100nm است. کمینه اندازه کانون براساس *FWHM* تعیین شده است. حد پراش به طور تئوری از رابطه $2.44\lambda f/D$ محاسبه می‌شود که f فاصله نقطه کانونی از فراعدسی، λ طول موج در محیط انتخابی جهت کانونی کردن نور که مقدار آن 700nm و D قطر فراعدسی طراحی شده است که مقدار آن 20160nm است. مقدار حاصل از رابطه تئوری با نتایج شبیه‌سازی در توافق خوبی است. *FWHM* پارامتر مفیدی است که معمولا برای شرح اندازه نقطه کانونی استفاده می‌شود. در شکل 3، *FWHM* کانون‌های تشکیل شده نشان داده شده است. شکل 3 د در محل $f_x=15\lambda$، *FWHM*=1000nm و در شکل 3 ه در محل $f_y=10\lambda$، *FWHM*=8100nm است.

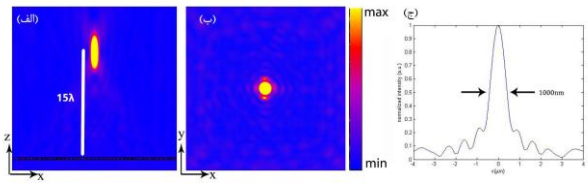


[1] Full Width at Half Maximum

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

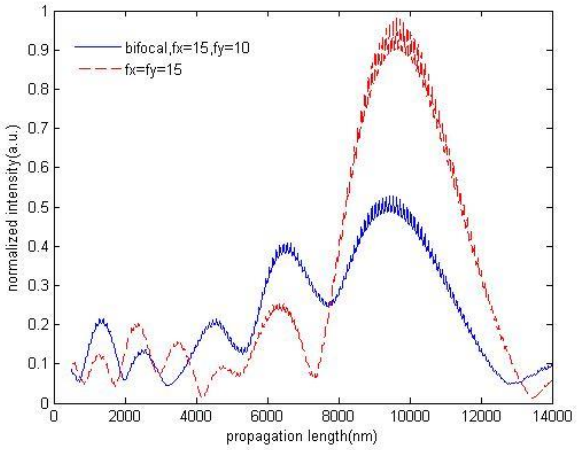
شکل 3. الف) توزیع میدان در راستای انتشار فراعدسی کروی در صفحه‌ی x وz، در محل y= 0 برای $f_x=15\lambda$ و$f_y=10\lambda$. توزیع میدان عرضی فراعدسی کروی و نمایش اندازه نقطه کانونی در صفحه‌ی x وy، در محل ب) $f_x=15\lambda$ ج) $f_y=10\lambda$. تغییر شدت در راستای محور x برای نمایش *FWHM* کانون‌های تشکیل شده در محل د)$f_x=15\lambda$ ه)$f_y=10\lambda$.

در مرحله بعد فرااتم‌ها را به گونه‌ای انتخاب شدند که مولفه‌های x و y تابش فرودی نور را در یک محل کانونی کنند یعنی $f_x= f_y$. با یکسان درنظرگرفتن f_x و f_y دو کانون روی یک‌دیگر تشکیل شده و شدت بیشتری در نقطه کانونی انتظار می‌ورد. در شکل 4 کانون قطبش‌های x و y یکسان درنظر گرفته شده، $f_x= f_y=15\lambda$، و نمایش مختلف نقطه کانونی نشان داده شده است. شکل 4 الف توزیع میدان در صحفه x و z را نمایش می‌دهد و در در شکل 4 ب برای نمایش نقطه کانونی توزیع میدان روی صفحه‌ی عرضی x و y نشان داده شده است. در شکل 4 ج تغییرات شدت در راستای محور x در محل کانون 15λ نشان داده شده است و مقدار *FWHM=1000* nm برای نقطه کانونی دیده می‌شود.



شکل 4. الف) توزیع میدان در راستای انتشار فراعدسی کروی در صفحه‌ی x وz، در محل y= 0 برای $f_x= f_y=15\lambda$ ب) توزیع میدان عرضی فراعدسی کروی در صفحه‌ی x وy، در محل کانون برای نمایش نقطه کانونی. ج) تغییر شدت در راستای محور x برای نمایش *FWHM* در محل کانون z=15λ.

در شکل 5 تغییرات شدت میدان بر حسب راستای انتشار z کانون فراعدسی تک کانونه و دو کانونه مقایسه شده‌اند. همان‌طور که انتظار می‌رود هنگامی که کانون فراعدسی دوکانونه در محل z=10λ (نمودار آبی رنگ شکل 5) به کانون در محل z=15λ نزدیک شده و روی آن قرارگیرد، در این مکان تک کانونی با شدت بیشتر تشکیل می‌شود که در نمودار قرمزرنگ شکل 5 نشان داده شده است. در این حالت بیشینه شدت حدود 50 درصد نسبت به بیشینه شدت کانون‌های عدسی دوکانونه افزایش یافته است. بنابراین با انتخاب مناسب فرااتم‌ها بر اساس کاربرد مورد نیاز به عدسی دوکانونه یا عدسی تک کانونه با شدت بالا، می‌توان هرکدام از آن‌ها را طراحی نمود.



شکل 5. مقایسه شدت بر حسب راستای انتشار z فراعدسی کروی یک کانونه با فراعدسی کروی دو کانونه

نتیجه گیری

در این پژوهش طراحی سه بعدی فراعدسی کروی دوکانونه با بازدهی کانون بالا انجام گرفت. استفاده از فرااتم‌های صلیبی شکل مورد استفاده در طراحی فراعدسی، با بکارگیری همزمان مولفه‌های x و y تابش فرودی که قطبش خطی 45^o داشت، تمام انرژی تابش فرودی را بهره‌برداری کرده و کانون‌هایی با بازدهی کانون بالای بیش از 90% تشکیل شدند. همچنین با اعمال عملکرد یکسان برای مولفه‌های x و y و ایجاد تک کانون بیشینه شدت میدان کانون تا حدود 50% افزایش پیدا کرد. حدپراش کانون‌های تشکیل شده با رابطه تئوری محاسبه شدند و مقادیر حاصل با مقدار حاصل از شبیه‌سازی توافق خوبی دارند(تفاوتی کمتر از 10%).

مرجع‌ها

[1] N. Yu, P. Genevet, M. Kats, F. Aieta, and Zeno Gaburro; "Light propagation with phase discontinuities: generalized laws of reflection and refraction,"; *Science*, vol. 334, no. 6054, pp. 333–337, 2011.
[2] Bazouband, F., Bazouband, E., Golestanizade, T., Sadooni, A. J., Mousavifard, M., Karimullah, A. S and Hashemi, M. (2021); "Efficient arbitrary polarized light focusing by silicon cross-shaped metaatoms"; *Journal of Physics D: Applied Physics*, *55*(9), 095108.
[3] Tian, S., Guo, H., Hu, J., and Zhuang, S. (2019); "Dielectric longitudinal bifocal metalens with adjustable intensity and high focusing efficiency"; *Optics Express*, *27*(2), 680-688.
[4] Khorasaninejad, M., Chen, W. T., Devlin, R. C., Oh, J., Zhu, A. Y., and Capasso, F. (2016); "Metalenses at visible wavelengths: Diffraction-limited focusing and subwavelength resolution imaging"; *Science*, *352*(6290), 1190-1194.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

محاسبه تحلیلی رابطه پاشندگی بلور فوتونی یک بعدی با لایه‌های اتلاف و بهره

ایرانشاهی، زهرا؛ رضوانی جلال، مسعود؛ چگل، رعد

گروه فیزیک و فوتونیک، دانشگاه ملایر، ملایر

چکیده

در این مقاله یک بلور فوتونی یک‌بعدی با دوره تناوب دو لایه‌ای که یکی از لایه‌ها دارای بهره و دیگری دارای اتلاف باشد در نظر گرفته می‌شود و رابطه پاشندگی آن مورد مطالعه قرار می‌گیرد. برای به دست آوردن رابطه پاشندگی از ماتریس انتقال موج استفاده می‌گردد. محاسبات نشان می‌دهد که اگر هیچ بهره و اتلافی در لایه‌ها وجود نداشته باشد نمودارهای پاشندگی شناخته‌شده که مؤید وجود گاف اپتیکی هستند به دست می‌آید. برای وقتی هم که یکی از لایه‌ها از نوع بهره و دیگری از نوع اتلافی باشد فقط یک فرکانس انتشاری پیدا می‌شود. موقعی هم که هر دو لایه به صورت اتلافی و یا دارای بهره باشند هیچ فرکانسی برای انتشار وجود نخواهد داشت. از محاسبات عددی چنین بر می‌آید که وقتی در یک تناوب بلوری هم عامل اتلاف و هم عامل بهره حضور داشته باشند در یک فرکانس خاصی عامل اتلاف با عامل بهره خنثی شود و امکان انتشار به وجود آید.

واژه های کلیدی: *بلور فوتونی، رابطه پاشندگی، اتلاف، بهره.*

Analytical Computation of Dispersion Relation for a One-dimensional Photonic Crystal with Loss and Gain Layers

Iranshahi, Zahra; Rezvani Jalal, Masoud; Chegel, Raad

Department of Physics and Photonics, Malayer University, Malayer

Abstract

In this paper, a one-dimensional photonic crystal with a two-layer period which one of them has gain and the other has loss is considered and its dispersion relation is studied. To find the dispersion relation the wave transfer matrix is used. The computations show that when no loss and no gain is present in the layers then the known dispersion plot which shows optical gap is obtained. When one of the layers has gain and the other one has loss then only a single frequency is found for propagation. For the case that both layers have loss or gain then no propagating wave will be existent. Computations show that when one of the layers has loss and the other one has gain then for a single special frequency the loss can be compensated with the gain and then the wave can propagate.

***Keywords**: Dispersion relation, gain, loss, photonic crystal.*

PACS No. 41, 42.

مقدمه

یک بلور فوتونی به ساختار تناوبی ضریب‌شکست گفته می‌شود که می‌تواند به صورت یک‌بعدی، دوبعدی و سه‌بعدی باشد [۱]. تناوبی بودن باعث می‌گردد که انتشار موج الکترومغناطیسی در آن دارای مشخصات فرکانسی خاصی باشد که از آن جمله می‌توان به ظهور گاف نوری و باند فرکانسی ممنوعه اشاره کرد. مطالعات نظری و تجربی فراوانی روی بلورهای فوتونی صورت گرفته و از آنها نیز در زمینه‌های مختلفی همچون ساخت موجبرها، تارهای نوری، مشددهای الکترومغناطیسی و ادوات اپتیکی همچون آینه‌ها، عدسی‌ها، صافی‌ها، سلول‌های خورشیدی، منشورها و ... استفاده

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

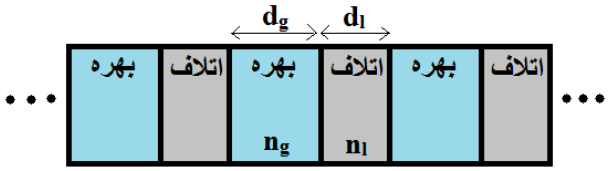
شده است [۲]. استفاده از محیط‌های مختلفی همچون مواد دی‌الکتریک، پلاسماها، گازها، مواد پلاسمونیکی و غیره در طراحی و ساخت بلورهای فوتونی و نیز ایجاد ناخالصی‌ها و عیوب ساختاری متنوع در آنها و مشاهده تأثیرات به دست آمده نیز به وفور در مراجع دیده می‌شود [۳].

علی‌رغم مطالعات و پیشرفت‌های بسیار زیادی که در حوزه بلورهای فوتونی وجود داشته است ولی همچنان سؤالات زیادی در این زمینه تحقیقاتی مهم قابل طرح است. از این موارد می‌توان به استفاده از مواد جاذب و یا تقویت‌کننده در ساخت بلورهای فوتونی اشاره کرد. حضور ماده‌ای که دارای جذب و یا تقویت باشد می‌تواند ویژگی‌های انتشاری بلور فوتونی را تغییر دهد. اگر محیط تقویت کننده (و یا جاذب و یا هر دوی آنها) فقط در قسمتی از بلور فوتونی باشند آنگاه می‌شود مسئله را از دیدگاه نقایص ساختاری مورد بررسی قرار داد که چنین کاری در مراجع انجام شده است [٦-٤]. حال اگر لایه بهره (و یا اتلاف) در همه تناوب‌های بلوری حضور داشته باشد دیگر نمی‌توان به سادگی آنرا حل کرد و باید از روش‌های دقیق نظری وارد موضوع شد. انجام چنین کاری در مراجع و مقالات دیده نمی‌شود و در مقاله حاضر با استفاده از روش ماتریس انتقال موج در یک بلور فوتونی یک‌بعدی با وضعیت انتشار عمود بر لایه‌ها مورد بررسی قرار خواهد گرفت.

ساختار مقاله بدین صورت است که ابتدا فرمول نظری برای رابطه پاشندگی در حضور لایه‌های بهره و اتلاف به دست می‌آید. سپس یک شبیه‌سازی عددی انجام می‌گیرد. در انتها نیز جمع‌بندی و نتیجه‌گیری آورده می‌شود.

رابطه پاشندگی در حضور بهره و اتلاف

برای سادگی کار یک بلور فوتونی یک‌بعدی در فرود قائم که هر تناوب آن شامل دو لایه (یکی دارای بهره و دیگری دارای اتلاف) است در نظر گرفته می‌شود. برای لحاظ کردن اتلاف و بهره می‌توان از مفهوم ضریب شکست مختلط استفاده کرد. محیطی که دارای تقویت باشد با ضریب‌شکست $n_g=n_{gr}+n_{gi}i$ و ضخامت d_g و محیطی که دارای اتلاف باشد هم با ضریب‌شکست $n_l=n_{lr}+n_{li}i$ و ضخامت d_l مشخص می‌شود، شکل ۱.



شکل ۱: طرح‌واره‌ای از یک بلور فوتونی دو لایه‌ای متشکل از یک لایه اتلاف و یک لایه بهره.

برای مطالعه دقیق مسئله می‌توان از روش ماتریس انتقال استفاده کرد [۱]. در این روش به هر محیط و نیز به هر سطح مشترک بین دو محیط یک ماتریس ۲×۲ اختصاص داده می‌شود و در نهایت نیز ماتریس انتقال مربوط به هر تناوب بلوری با ضرب ماتریسی به دست می‌آید. در یک بلور فوتونی، تعداد تناوب‌ها بی‌نهایت است و نقاطی که در سمت چپ و راست شکل ۱ قرار داده شده‌اند در واقع بی‌نهایت بودن بلور را از طرفین نشان می‌دهند. برای یافتن رابطه پاشندگی چنین بلوری ابتدا باید ماتریس انتقال موج یک تناوب بلوری را یافت. موج الکترومغناطیسی در انتقال از یک تناوب بلوری (شکل ۱) دو محیط با ضخامت های d_g و d_l را طی می‌کند و از دو سطح مشترک یعنی بهره–اتلاف و اتلاف–بهره عبور می‌نماید. ماتریس انتقال مربوط به این انتشارها و عبورها به صورت زیر هستند [۱]:

$$T_{g\to l}=\frac{1}{2n_l}\begin{bmatrix} n_l+n_g & n_l-n_g \\ n_l-n_g & n_l+n_g \end{bmatrix} \quad (۱)$$

$$T_l=\begin{bmatrix} e^{-ikn_ld_l} & 0 \\ 0 & e^{ikn_ld_l} \end{bmatrix} \quad (۲)$$

$$T_{l\to g}=\frac{1}{2n_l}\begin{bmatrix} n_g+n_l & n_g-n_l \\ n_g-n_l & n_g+n_l \end{bmatrix} \quad (۳)$$

$$T_g=\begin{bmatrix} e^{-ikn_gd_g} & 0 \\ 0 & e^{ikn_gd_g} \end{bmatrix} \quad (٤)$$

ماتریس انتقال موج یک تناوب بلوری نیز به شکل زیر خواهد شد:

$$T = T_gT_{l\to g}T_lT_{g\to l} \quad (٥)$$

که حاصل ضرب ماتریس آن طولانی است و در اینجا از ذکر آن خودداری شده است. برای به دست آوردن رابطه پاشندگی باید عملکرد یک تناوب بلوری بر انتشار موج الکترومغناطیسی را به دست آورد. انجام این کار به معادله مشخصه زیر منجر می شود:

$$\begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} E_+ \\ E_- \end{bmatrix} = e^{-iK\Lambda}\begin{bmatrix} E_+ \\ E_- \end{bmatrix} \quad (٦)$$

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

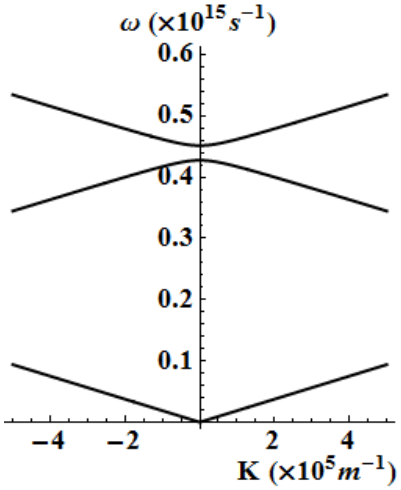
که در آن T_{ij} درایه‌های ماتریس T، $E_{\pm}$ دامنه‌های میدان‌های راست-رو و چپ-رو، K عدد موج و Λ هم دوره تناوب بلور (در اینجا $\Lambda=d_g+d_l$) می‌باشد. اگر قرار باشد که رابطه (٦) دارای جواب باشد باید دترمینان ماتریس مشخصه برابر با صفر قرار داده شود:

$$\begin{vmatrix} T_{11}-e^{-iK\Lambda} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22}-e^{-iK\Lambda} \end{vmatrix} = 0 \qquad (٧)$$

این معادله، همان معادله پاشندگی است که ارتباط بین K و ω را از طریق $k=\omega/c$ به دست می‌دهد. البته لازم نیست که حتماً تعداد لایه‌های موجود در هر تناوب دو لایه باشد و می‌توان هر تعداد لایه را در نظر گرفت. همانطور که گفته شد در این مقاله فقط دو لایه که یکی دارای بهره و دیگری دارای اتلاف باشد انتخاب شده است. در ادامه به نتایج شبیه‌سازی پرداخته می‌شود.

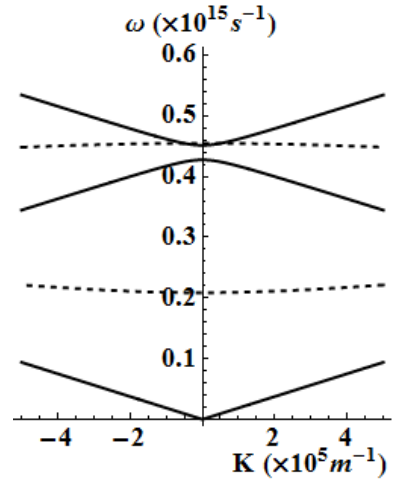
نتایج محاسبات عددی و بحث در مورد آنها

یک بلور فوتونی اختیاری با لایه‌هایی به ضریب‌شکست n_g=1.4 و n_l=1.7 و ضخامت های d_g=1μm و d_l=1.7μm در نظر گرفته می‌شود. فعلاً برای لایه‌ها هیچ نوع اتلاف یا بهره‌ای در نظر گرفته نشده است و به عبارت دیگر، ضرایب شکست به صورت حقیقی لحاظ گردیده‌اند. برای این بلور، ماتریس انتقال موج کل T (رابطه (٥)) تشکیل داده می‌شود و سپس معادله مشخصه (٧) حل می‌گردد و نمودار پاشندگی به دست می‌آید. یک برنامه رایانه‌ای توسط نویسندگان مقاله در محیط Mathematica توسط نویسندگان مقاله توسعه داده شده است که این کارها را انجام می‌دهد. در شکل ٢ نمودار پاشندگی برای این بلور آورده شده است. از این شکل کاملاً مشخص است که نمودار پاشندگی شامل گاف نوری می‌باشد. حال مقادیر کوچکی از اتلاف و بهره به لایه‌ها اضافه می‌گردد. برای انجام این کار کافی است که ضرایب شکست را مختلط گرفت. فرض کنید که ضریب‌شکست محیط بهره را به شکل n_g=1.4+0.001i و ضریب‌شکست محیط اتلافی را هم به صورت n_l=1.7-0.001i در نظر بگیریم. در این حالت باز هم رابطه پاشندگی را به دست می‌آوریم و سعی می‌کنیم که آنرا ترسیم کنیم. ترسیم معادله پاشندگی نشان می‌دهد که نموداری برای آن وجود ندارد و این رابطه فقط در یک (و یا چند) نقطه مشخص جواب دارد.



شکل ٢: منحنی پاشندگی بلور فوتونی بدون بهره و اتلاف.

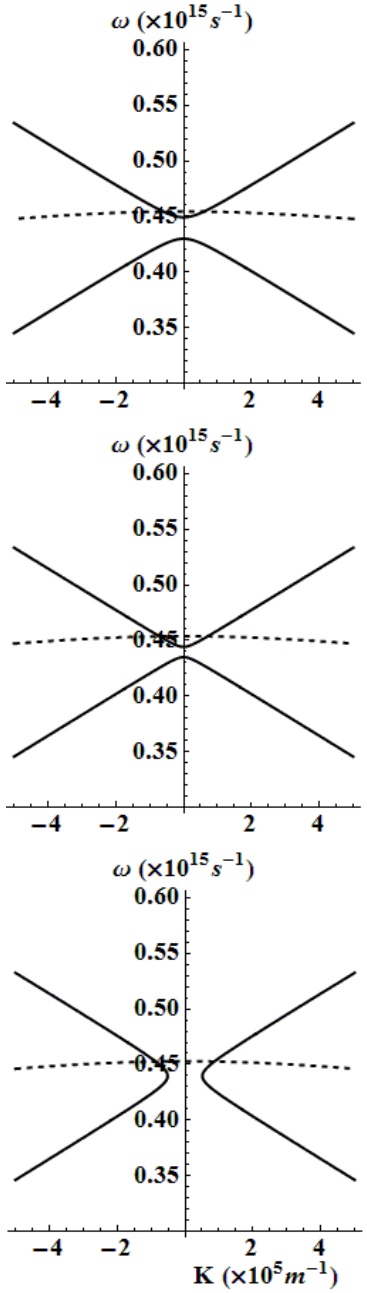
برای سادگی کار بهتر است که قسمت حقیقی و موهومی رابطه پاشندگی ترسیم شوند تا نقطه تلاقی آنها که نشانگر جواب قابل‌قبول است به دست آید. در شکل ٣ این کار انجام شده است:



شکل ٣: قسمت‌های حقیقی (نمودار پررنگ) و موهومی (نمودار خط‌چین) برای بلور فوتونی که یکی از لایه‌ها دارای اتلاف و دیگری دارای بهره است.

از شکل ٣ مشخص است که فقط دو نقطه تلاقی وجود دارد و به عبارت دیگر، فقط یک فرکانس (با دو عدد موج حقیقی) در چنین بلور فوتونی قابل انتشار هستند. این مقادیر در جدول ١ درج شده‌اند. برای مقادیر ضریب‌شکست موهومی 0.1i، 0.15i و 0.2i نیز نمودارهای مربوطه (در قسمت تلاقی) و فرکانس و عددموج قابل انتشار در شکل ٤ و جدول ١ آورده شده‌اند:

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل ٤: قسمت‌های حقیقی (نمودار پررنگ) و موهومی (نمودار خط‌چین) رابطه پاشندگی در یک بلور فوتونی با لایه‌های اتلافی با قسمت موهومی $0.1i$ (شکل بالا)، $0.15i$ (شکل وسط) و $0.2i$ (شکل پایین).

جدول ۱: فرکانس و عدد موج قابل انتشار در بلور فوتونی در حضور اتلاف و بهره در لایه‌های تناوب بلوری.

مقدار ضریب شکست موهومی	عدد موج (×۱۰^۵)	فرکانس (×۱۰^۱۵)
0.0001i	0.45	0.455
0.1i	0.61	0.454
0.15i	0.71	0.453
0.2i	0.86	0.452

از جدول ۱ مشخص است که با افزایش اتلاف، عدد موج نیز قدری افزایش پیدا می‌کند ولی فرکانس تا حدی ثابت می‌ماند. البته باید مد نظر داشت که تلاقی نمودارها که در شکل‌های (۳) و (٤) دیده می‌شود فقط برای وقتی است که یکی از لایه‌ها دارای اتلاف و دیگری دارای بهره باشد و برای وقتی که هردو به صورت اتلافی و یا تقویتی باشند هیچ مد انتشاری وجود نخواهد داشت.

نتیجه‌گیری

در این مقاله، یک بلور فوتونی با تناوب دولایه‌ای که یکی از لایه‌ها دارای بهره و دیگری دارای اتلاف بود در نظر گرفته شد و رابطه پاشندگی آن به دست آمد. از حل رابطه پاشندگی معلوم شد که فقط یک فرکانس پایدار قابل انتشار است. به نظر می‌آید که در این فرکانس خاص، تضعیف ناشی از لایه اتلاف با تقویت ناشی از لایه بهره جبران می‌شود به گونه‌ای که فرکانس مربوطه می‌تواند شرایط خود را برای انتشار برآورده کند. این موضوع می‌تواند به عنوان یک کشف تلقّی شود و در واقع بیانگر نوع خاصی از مدهای الکترومغناطیسی در داخل بلورهای فوتونی با لایه‌های بهره‌دار و اتلاف‌دار باشد. بررسی چنین مدهایی در تناوب‌های چند لایه‌ای و یافتن توزیع میدان مربوطه جزء کارهای آتی نویسندگان می‌باشد.

سپاسگزاری

از دانشگاه ملایر به خاطر حمایت از این کار تحقیقاتی قدردانی می‌گردد.

مرجع‌ها

[۱] صالح، بهاء؛ *مبانی فوتونیک*، ترجمه: محمدصادق ابریشمیان، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، ۱۳۹۳.

[۲] Alongkarn Chutinan et al, “High-efficiency photonic crystal solar cell architecture”, *Optics Express*, **17** (11), (2009) 8871.

[۳] گلزاری ضمیر، سعیده؛ عبدی کیان؛ علیرضا، "بلور فوتونی یک بعدی با دو لایه پلاسما"، *کنفرانس فیزیک ایران ۱۳۹۹*، دانشگاه رازی.

[۴] Kazem Jamshidi-Ghaleh, Zeinab Ebrahimpour, Fatemeh Moslemi, “Amplifying and compressing optical filter based on one-dimensional ternary photonic crystal structure containing gain medium”, *Physica B* **468-469** (2015) 72–75.

[۵] A. M. Grishin, “Amplifying magneto-optical photonic crystal”, *APPLIED PHYSICS LETTERS* **97**, (2010) 061116.

[۶] Yuliya Dadoenkova, “Optical generation in an amplifying photonic crystal with an embedded nanocomposite polarizer”, Optics Communications, **15**, (2017) 1-4.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

افزایش پهنای باند فرکانسی در نوسانگر پارامتری فمتوثانیه با استفاده از آرایش غیر همخط

دلنیا پورقباد[۱]، هاوژین جلیلی[۱]، مسعود قطبی[۱]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه کردستان، سنندج

چکیده

در اینجا نوسانگر پارامتری نوری غیرهمخط فمتوثانیه بر اساس کریستال BIBO را مورد بررسی قرار داده‌ایم. نوسانگر پارامتری نوری به روش دمش همزمان توسط هماهنگ دوم لیزر فمتوثانیه Yb:KGW و با استفاده از هندسه‌ی تطبیق‌فاز غیرهمخط نوع I (o → e+e) در صفحه‌ی اپتیکی yz، در طول موج ۵۱۵ نانومتر پمپ شده است. اندازه‌گیری مشخصه‌های طیفی و زمانی پالس‌های سیگنال، مزیت آرایش غیر همخط را در افزایش پهنای باند فرکانسی و تولید پالس‌های کوتاه‌تر نشان می‌دهد.

واژه های کلیدی: *نوسانگر پارامتری نوری، پالس فمتوثانیه، پمپاژ همزمان، تطبیق‌فاز غیرهمخط*

Increasing the Spectral Bandwidth of a Femtosecond Optical Parametric Oscillator Using Noncollinear Configuration

Delnia Pourghobad[1], Hawzhin Jalili[1], Masood Ghotbi[1]

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

Abstract

Here we have investigated on a femtosecond Optical Parametric Oscillator (OPO) based on BIBO crystal in Noncollinear configuration. The OPO is synchronously pumped using the second harmonic pulses of a femtosecond Yb:KGW laser at 515 nm. The spectral and temporal measurements of the generated signal pulses show the priority of using the noncollinear configuration in producing larger spectral bandwidths and shorter pulse durations.

***Keywords**: Optical Parametric Oscillator, Synchronously pump, Noncollinear Phase Matching*

PACS No.

مقدمه

نوسانگر پارامتری نوری[۱] با دمش همزمان[۲]، به عنوان یک چشمه‌ی همدوس و تنظیم پذیر از پالس‌های پیکوثانیه و فمتوثانیه بسیار مورد توجه قرار دارد. ظهور مواد غیرخطی جدید و پیشرفت‌های اخیر در زمینه‌ی لیزرهای فمتوثانیه، که از آن‌ها به عنوان پمپ نوسانگر پارامتری نوری استفاده می‌شود، امکان توسعه‌ی این وسیله را فراهم کرده است. پالس‌های فوق کوتاه تولید شده توسط نوسانگرهای پارامتری نوری، با قابلیت تنظیم پذیری گسترده، توان متوسط بالا، کیفیت پرتوی خوب و نرخ

[۱] Optical Parametric Oscillator (OPO)

[۲] Synchronously pump

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تکرار بالا، باعث شده است که این وسیله در محدوده‌ی وسیعی از کاربردها، از طیف سنجی زمانی، پردازش مواد، لیدار، پایش آلودگی تا تشخیص‌های پزشکی، تصویربرداری پزشکی و جراحی مورد استفاده قرار گیرد [۲,۱].

عملکرد این وسیله بر اساس تولید بسامد تفاضلی[۱] در یک کریستال غیرخطی است که در آن یک فوتون پمپ با انرژی بالاتر به دو فوتون با انرژی پایین‌تر با نام‌های سیگنال و آیدلر تبدیل می‌شود. در نتیجه‌ی قانون بقای انرژی، مجموع انرژی دو فوتون ایجاد شده باید برابر با انرژی فوتون دمش باشد. یکی از جذابیت‌های اصلی نوسانگر پارامتری نوری این است که طول موج‌های سیگنال و آیدلر، که با توجه به شرایط تطبیق فاز[۲]، نوع بلور غیرخطی و مشخصه‌ی پمپ تعیین می‌شوند، می‌توانند در محدوده‌ی وسیعی از طول‌موج‌ها تنظیم‌پذیر باشند [۴,۳].

کریستال BIBO

کریستال‌های اپتیکی غیرخطی متفاوتی از جمله KTP ($KTiOPO_4$)، BBO (BaB_2O_4) و LBO (LiB_3O_5) به طور گسترده برای این کاربرد مورد بررسی قرار گرفته‌اند. کریستالی که در این زمینه ویژگی‌های مورد توجهی دارد BIBO (BiB_3O_6) است. BIBO یک کریستال غیرخطی است که از حدود ۲۸۰ نانومتر در طول موج فرابنفش تا ۲۷۰۰ نانومتر در طول موج فروسرخ شفاف است. این کریستال به عنوان یک کریستال دومحوری[۳] دارای ویژگی‌های خاصی از جمله، مقاومت در مقابل رطوبت، آستانه‌ی آسیب‌پذیری بالا، تنوع تطبیق‌پذیری فازی، پذیرفتاری‌های طیفی و زاویه‌ای[۴] بالا، ضرایب غیرخطی موثر بالا و جداشدگی زاویه‌ای[۵] پایین می‌باشد [۵-۷].

تطبیق فاز همخط[۶] در کریستال BIBO برای پالس های فوق سریع از محدوده‌ی طیفی فرابنفش تا محدوده‌ی طیفی فروسرخ به صورت نتایج تجربی نشان داده شده است، از جمله تولید هماهنگ دوم[۷] با استفاده از لیزرهای پیکوثانیه و فمتوثانیه [۸-۱۰] و تولید هماهنگ سوم[۸] [۱۱]. نوسانگرهای پارامتری نوری براساس کریستال BIBO با استفاده از تطبیق‌فاز همخط نیز مورد بررسی قرار گرفته اند. این نوسانگرها توسط لیزرهای فمتوثانیه در محدوده‌های مرئی [۱۳,۱۲]، فروسرخ [۱۴] و لیزرهای نانوثانیه [۱۵] پمپ شده‌اند. همچنین تاثیر تطبیق فاز غیرهمخط[۹] بر روی پالس‌های خروجی نوسانگر پارامتری نوری بر اساس کریستال BBO مورد بررسی قرار گرفته است [۱۶].

تطبیق فاز غیرهمخط

در کریستال دومحوری BIBO، زاویه‌ی فضایی ایجاد شده میان بردارهای شار انرژی[۱۰] پرتوهای عادی[۱۱] و غیرعادی[۱۲] را زاویه‌ی جداشدگی فضایی[۱۳] می‌نامند. اثرات جداشدگی فضایی می‌تواند طول موثر برهم‌کنش و راندمان تبدیل را محدود کند، آستانه‌ی عملکرد نوسانگر را افزایش دهد و سبب کاهش کیفیت پرتو شود. آرایش تطبیق فاز غیرهمخط، روشی موثر برای کاهش اثر جداشدگی فضایی می‌باشد. در این روش با ایجاد زاویه بین پرتوهای سیگنال و پمپ، به‌طوری که زاویه‌ی ایجاد شده برابر و در خلاف جهت زاویه‌ی جداشدگی فضایی باشد، هم‌پوشانی میان این پرتوها افزایش می‌یابد.

از مزایای تطبیق فاز غیرهمخط در نوسانگر پارامتری نوری نسبت به تطبیق فاز همخط، می‌توان به افزایش پهنای باند طیفی و کاهش مدت زمان پالس خروجی اشاره کرد. همچنین امکان دستیابی به طول موج‌های کوتاه‌تری برای سیگنال فراهم می‌شود.

با توجه به اینکه در هندسه‌ی تطبیق فاز غیرهمخط اثرات جداشدگی فضایی تا حدودی جبران می‌شود، می‌توان از کریستال-هایی با طول بیشتر استفاده کرد و در نتیجه راندمان تبدیل بالاتر رفته و آستانه‌ی عملکرد نوسانگر نیز کاهش می‌یابد [۱۸,۱۷].

---

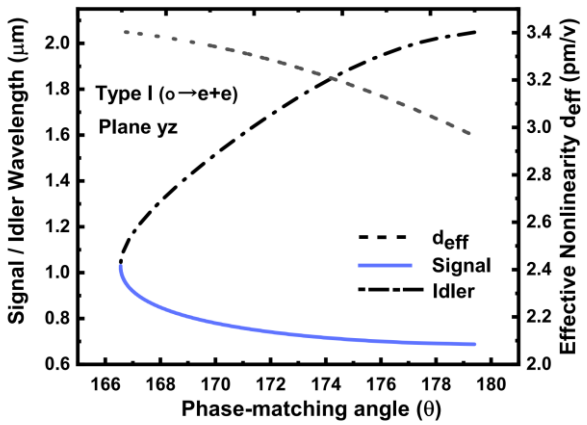
[۱] Difference Frequency Generation (DFG)
[۲] Phase-Matching
[۳] Biaxial
[۴] Spectral and angular acceptance
[۵] Angular walk-off
[۶] Collinear Phase-Matching
[۷] Second Harmonic Generation
[۸] Third Harmonic Generation
[۹] Collinear Phase-Matching
[۱۰] Poynting vector
[۱۱] ordinary
[۱۲] extraordinary
[۱۳] Spatial walk-off

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

روش آزمایش و نتایج تجربی

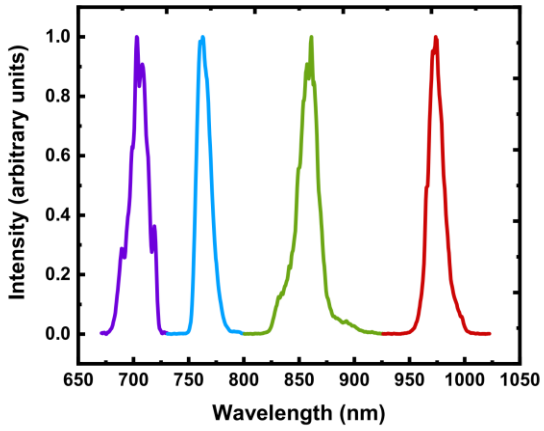
در این کار، نوسانگر پارامتری نوری غیرهمخط فمتوثانیه، به روش دمش همزمان توسط هماهنگ دوم لیزر Yb:KGW (Yb^{3+}:$KGd(WO_4)_2$) پمپ شده است. لیزر Yb:KGW دارای طول موج ۱۰۳۰ نانومتر، توان میانگین ۶ وات و نرخ تکرار ۷۵ مگاهرتز است و پالس‌هایی با دوره‌ی زمانی fs ۱۰۰ تولید می‌کند. این نوسانگر بر اساس کریستال BIBO می‌باشد و در اینجا آرایش تطبیق‌فاز غیرهمخط نوع I (o→e+e) در صفحه‌ی اپتیکی yz در نظر گرفته شده است.

به‌منظور تنظیم زاویه‌ی غیرهمخط میان بردارهای موج سیگنال و دمش، استفاده از منحنی طول موج سیگنال بر حسب زاویه‌ی تطبیق فاز در آرایش همخط ضرورت دارد. در شکل۱ محدوده‌ی تنظیم طول‌موج‌های سیگنال و آیدلر به صورت تابعی از زاویه‌ی تطبیق فاز همخط در صفحه‌ی yz نشان داده شده است. طول موج پمپ ثابت و برابر با ۵۱۵ نانومتر می‌باشد. همچنین منحنی ضریب غیرخطی موثر بر حسب زاویه‌ی تطبیق فاز در همین شکل رسم شده است.



شکل۱: تنظیم‌پذیری سیگنال و آیدلر به صورت تابعی از زاویه‌ی تطبیق فاز (به ترتیب، خط پیوسته، نقطه خط) و منحنی ضریب موثر غیرخطی به صورت تابعی از زاویه‌ی تطبیق‌فاز خطی (نقطه‌چین).

جهت برآورده کردن شرایط پمپاژ همزمان به کمک تنظیم دقیق طول کاواک نوسانگر پارامتری نوری، آینه‌ی خروجی بر روی یک پایه‌ی قابل جابجایی و برای تنظیم زاویه‌ی تطبیق فاز کریستال BIBO، کریستال بر روی یک پایه‌ی چرخان قرار داده شده است. طیف اندازه‌گیری شده‌ی سیگنال در زوایه‌های مختلف کریستال، توسط طیف سنج در طول موج‌های مرکزی ۷۰۰ نانومتر، ۸۲۳ نانومتر، ۸۵۵ نانومتر و ۹۷۵ نانومتر در شکل۲ نشان داده شده است. مشخصه‌ی زمانی پالس‌های سیگنال توسط دستگاه خودهمبسته-ساز[۱] اندازه‌گیری شده است. در شکل۳ داده‌های تجربی به دست آمده به همراه منحنی برازش تابع گاوسی، در طول موج مرکزی ۷۰۰ نانومتر نشان داده شده است. مدت زمان پالس حدود ۴۶ فمتوثانیه و پهنا در نصف مقدار بیشینه (FWHM) در طول موج مرکزی ۷۰۰ نانومتر، ۱۷ نانومتر به دست آمده است. پالس‌های سیگنال خروجی نوسانگر پارامتری نوری، که دارای توان ۵۰۰ میلی‌وات هستند، با جبران اثرات پاشندگی[۲] توسط یک جفت منشور که خارج از کاواک قرار دارند، متراکم شده‌اند. این توان سیگنال نشانگر یک راندمان تبدیل از پمپ به سیگنال در حدود ۱۸٪ می‌باشد.

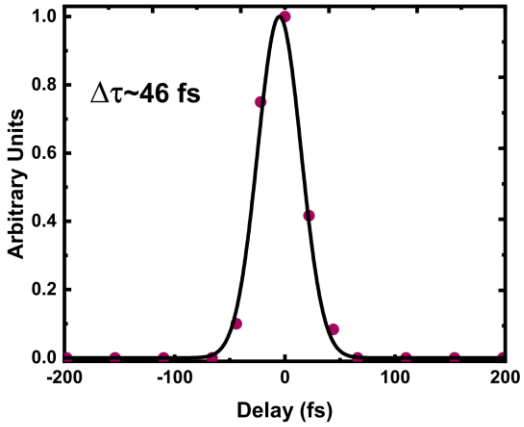


شکل۲: طیف‌های اندازه‌گیری شده سیگنال توسط طیف سنج در طول‌موج‌های مرکزی ۷۰۰ نانومتر، ۸۲۳ نانومتر، ۸۵۵ نانومتر و ۹۷۵ نانومتر.

[۱] Autocorrelator

[۲] Group velocity dispersion (GVD)

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل۳: خودهمبستگی تداخلی معمولی پالس سیگنال برای طول موج مرکزی ۷۰۰ نانومتر، دوره زمانی پالس ۴۶ fs~ و پهنای‌باند طیفی ۱۷ nm ~ محاسبه شده است. داده ها تجربی(دایره‌های توپر) و منحنی برازش(خط پیوسته).

در نوسانگر پارامتری نوری همخط، اندازه‌گیری زمانی پالس سیگنال منجر به تولید پالس‌هایی حدود ۷۰ تا ۱۱۰ فمتوثانیه شده است [۱۵]، اما در این کار با استفاده از آرایش غیرهمخط، نه تنها محدوده‌ی وسیع‌تری از طول موج‌ها را پوشش می‌دهد، بلکه پهنای باند فرکانسی به دست آمده بزرگ‌تر شده و پالس‌های کوتاه‌تری در حدود ۴۵ تا ۹۰ فمتوثانیه تولید شده است.

نتیجه گیری

در این پژوهش، نوسانگر پارامتری نوری غیرهمخط فمتوثانیه بر اساس کریستال BIBO، که توسط هماهنگ دوم لیزر Yb:KGW به صورت همزمان پمپ شده است را مورد بررسی قرار دادیم. نشان دادیم که آرایش تطبیق فاز غیرهمخط دارای چندین مزیت نسبت به تطبیق فاز همخط است. در نوسانگر پارامتری نوری غیرهمخط فمتوثانیه، به کمک تنظیم زاویه‌ی کریستال و تنظیم طول کاواک، نوسانگر قادر خواهد بود که محدوده‌ی وسیعی از طول-موج‌ها را پوشش دهد و امکان دست‌یابی به طول موج‌های کوتاه-تری برای سیگنال فراهم کند. به علاوه این روش اثرات جداشدگی فضایی را تا حدودی جبران می‌کند و منجر به افزایش راندمان تبدیل و در نتیجه کیفیت و توان خروجی بالاتر می‌شود. همچنین پالس‌های خروجی با پهنای طیفی وسیع‌تر و مدت زمان بسیار کوتاه‌تری قابل تولید است.

مرجع‌ها

[۱] N. Coluccelli, D. Viola, et al; "Tunable 30 fs light pulses at 1 W power level from a Yb-pumped optical parametric oscillator"; Opt. Lett. **42**, (2017) 546-4548.
[۲] F. Kienle, D. Hanna, et al; "Compact, high-pulse-energy, picosecond optical parametric oscillator"; Opt. Lett. **35**, (2010) 3580-3582.
[۳] G. W. Baxter, P. Schlup, I. T. McKinnie, J. Hellström, and F. Laurell; "Single-Mode Near-Infrared Optical Parametric Oscillator Amplifier Based on Periodically Poled 4 KTiOPO"; J. Appl. Opt. **40**, (2001) 6659-6662.
[۴] W. R. Bosenberg, L. K. Cheng, and C. L. Tang; "Ultraviolet optical parametric oscillation in beta-BaB_2O_4"; J. Appl. Phys. Lett. **54**, (1989) 13-15.
[۵] E. P. Becker, J. Liebertz, L. Bohaty, J. Cryst. Growth; "Top-seeded growth of bismuth triborate, BiB_3O_6"; J. Cryst. Growth **203**, (1999) 149-155.
[۶] H. Hellwing, J. Liebertz, L. Bohaty; " Linear optical properties of the monoclinic bismuth borate BiB_3O_6"; J. Appl. Phys. **88**, (2000) 240-246.
[۷] M.Ghotbi and M. Ebrahim-zadeh; "Optical second harmonic generation properties of BiB3O6"; Opt. Express **12**, (2004) 6002- 6019.
[۸] V. Major, K. Sukhoy, H. Zhao and I. T. Lima Jr; "Green sub-nanosecond microchip laser based on BiBO crystals"; Laser Phys. Lett. **21**, (2011) 57-60.
[۹] A. Major, D. Sandkuijl and V. Barzda; " Efficient frequency doubling of a femtosecond Yb:KGW laser in a BiB_3O_6 crystal"; Opt. Express **17**, (2009) 12039-12042.
[۱۰] Y. F. L¨u, X. H. Zhang, R. Chen, J. Xia, J. F. Chen and Z. T. Liu; "Diode-pumped Nd:YVO4/BiBO blue laser at 440 nm"; Laser Phys. Lett. **7**, (2010) 347-349.
[۱۱] K. Miyata, N. Umemura and K . Kato; "Phase-matched pure third-harmonic generation in noncentrosymmetric BiB_3O_6"; Opt. Lett. **34**, (2009) 500-502.
[۱۲] M. Ghotbi, A. Esteban-Martin and M. Ebrahim-Zadeh; "BiB_3O_6 femtosecond optical parametric oscillator"; Opt. Lett. **31**, (2006) 3128-3130.
[۱۳] W Tian, Z Wang, X Meng, N Zhang, J Zhu, Z Wei; " High-power, widely pumped femtosecond BiB_3O_6 optical parametric oscillator"; Opt. Lett. **41**, (2016) 4851-4854.
[۱۴] A. Esteban-Martin, V. Ramaiah-Badarla, V. Petrov and M. Ebrahim-Zadeh; "Broadband, rapidly tunable Ti:sapphire-pumped BiB_3O_6 femtosecond optical parametric oscillator"; Opt. Lett. **36**, (2011) 1671-1673.
[۱۵] M. Peltz, J. Bartschke, A. Borsutzky, R. Wallenstein, S. Vernay, T. Salva and D. Rytz; "Bismuth triborate (BiB_3O_6) optical parametric oscillators"; J. Appl. Phys. B **80**, (2005) 55–60.
[۱۶] L. A. Gloster, I. T. McKinnie, T.A. King; "Nonlinear Phase matching in a type I barium borat optical parametric oscillator"; Opt. Commn. **112**, (1994) 328-332.
[۱۷] R. Akbari, A. Major; " Optical, spectral and phase-matching properties of BIBO, BBO and LBO crystals for optical parametric oscillation in the visible and near-infrared wavelength ranges"; Laser Phys. Lett. **23**, (2013) 35401-35409.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

طراحی و ساخت باتری رادیوولتائیک دو اثره بر اساس پرتوهای آلفا و بتا

مؤیدی ، حسین[1] ؛ حاجی‌بابا، سهیل[2] ؛ اطاعتی ، غلامرضا[1] ؛ عینیان، محمدرضا[3]

[1]دانشکده فیزیک و مهندسی انرژی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران
[2] دانشکده فیزیک، دانشگاه تهران، تهران
[3] دانشکده مهندسی هسته‌ای، دانشگاه شهید بهشتی، تهران

چکیده

باتری های هسته‌ای دستگاهی هستند که انرژی انباشت ناشی از فروپاشی رادیوایزوتوپ های ساطع کننده ذرات را به الکتریسیته تبدیل می کند. چگالی انرژی بالا، عمر طولانی، مقیاس کوچک، وزن سبک، کوچک سازی آسان و ... از مزایای این دستگاه‌ها است. در این مقاله یک باتری هسته‌ای دو اثره بر اساس رادیوایزوتوپ‌های Sr/Y90 و Am/241 طراحی و شبیه سازی شده است. شبیه سازی با کدهای محاسباتی ترکیبی انجام شد. برای محاسبه خروجی نهایی این باتری از کدهای محاسباتی MCNP و MATLAB استفاده شد. این کدها برای محاسبه انرژی انباشت ذرات بتا/آلفا و زوج الکترون-حفره تولید شده در نیمه رسانا استفاده شد. دو دیود سیلیکونی تک کریستالی مستطیلی و دایره ای با ضخامت 300 و 500 میکرومتر (به ترتیب) و رادیو ایزوتوپ‌های Sr/Y90 و Am/241 با فعالیت 20 و 1.1 میلی کوری (به ترتیب) و در هر دو شبیه سازی و ساخت استفاده شد. نتایج شبیه‌سازی در مقایسه با نتایج تجربی نشان‌دهنده دقت بالای شبیه‌سازی است.

واژه های کلیدی: *باتری هسته‌ای، مونت کارلو، امرسیوم 241، استرانسیوم 90*

Design and fabrication of dual-effect radio-voltaic battery using alpha and beta radiations

Moayedi, Hosein[1]; Hajibaba, Soheil[2]; Etaati, Gholamreza[1]; Einian, Mohammadreza[1]

[1] Department of Energy Engineering and Physics, Amirkabir University of Technology, Tehran
[2] Department of Physics, University of Tehran, Tehran
[3] Department of Nuclear engineering, Shahid Beheshti University, Tehran

Abstract

Nuclear batteries are a device that converts the energy deposition due to the decay energy of emitting radioisotopes into electricity. High energy density, long lasting life, small scale, light weight, easy miniaturization and… are some advantages of this devices. In this paper, we have designed and simulated a dual-effect nuclear battery based on Sr/Y90 and Am/241 radioisotopes. Simulation is investigated with multiple calculation codes. MCNP and MATLAB computational codes are used to calculate the final output of this battery. These codes used for calculation of the deposited energy from beta/alpha particles and generated electron-hole pair in the semiconductor. Two rectangular and circular monocrystal silicon PIN diode with thicknesses of 300 and 500 micrometers (respectively), Sr/Y90 and Am/241 radioisotopes with 20 and 1.1 mCi (respectively) activity used in both simulation and experimental setup. Simulation results in compare with experimental results indicate the high accuracy of the simulation.

***Keywords**: Nuclear battery, Monte Carlo, Americium 241, strontium 90*

PACS No. 28

مقدمه

باتری های هسته ای منابع انرژی با طول عمر بالایی هستند که در سال های اخیر مورد توجه تحقیقات قرار گرفته اند. این باتری ها بر اساس مکانیسم آنها به دو نوع تبدیل مستقیم و غیر مستقیم تقسیم می شوند [1]. باتری های بتاولتائیک و آلفاولتائیک نمونه های معروفی از نوع تبدیل مستقیم این باتری ها هستند که در آن یک مبدل نیمه رسانا به طور مستقیم ذرات بتا یا آلفا را به الکتریسیته تبدیل می کند. با این حال باتری‌های تبدیل مستقیم معمولاً بازده بالاتری نسبت به باتری‌های غیرمستقیم دارند، باعث آسیب تابشی به کریستال‌های نیمه‌رسانا می‌شوند و در نتیجه طول عمر آنها کاهش می‌یابد [2،3].

باتری‌های رادیولومینسانس [4] نمونه‌ای از باتری‌های تبدیل غیرمستقیم هستند که از یک ماده فسفر برای تبدیل تشعشعات ساطع شده از منبع رادیواکتیو به نور استفاده می‌کنند، سپس از

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

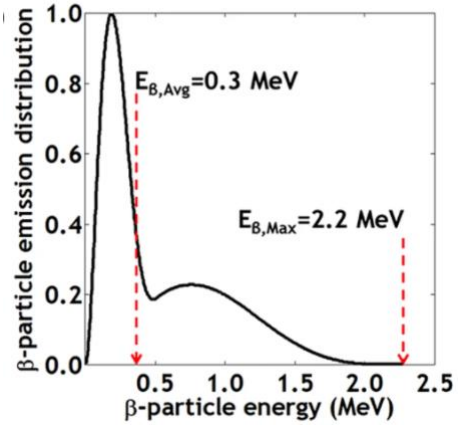
یک سلول فوتوولتائیک برای جمع‌آوری نور و تبدیل آن به الکتریسیته استفاده می‌کنند. این باتری ها نسبت به باتری های تبدیل مستقیم راندمان کمتری دارند، اما عمر طولانی تری دارند. از آنجایی که دقت شبیه‌سازی‌های کامپیوتری در سال‌های اخیر بهبود یافته است، از آن‌ها برای صرفه‌جویی در زمان و هزینه قبل از انجام آزمایش استفاده می‌شود.

در این مقاله ما یک باتری رادیوولتائیک دو اثره بر اساس رادیوایزوتوپ های Am-241 و Sr/Y90 با استفاده از کد ترکیبی MCNP/MATLAB [5،6] ، طراحی و شبیه‌سازی کرده و نتایج را با نتایج حاصل از بخش تجربی مقایسه کردیم.

در سال 2021 مؤیدی و همکاران باتری رادیولومینسانس را با چهار رادیوایزوتوپ متفاوت شبیه سازی کرده و به ولتاژ خروجی 0.3 ولت و جریان خروجی 348 نانوآمپر برای چشمه استرانسیوم 90 دست یافتند. [4] ساتساکیس و همکاران در سال 2019 ضمن بررسی تجربی خواص نوری نانو ذرات روس سولفید تحت تابش پرتو ایکس به بیان روابط نظری برای محاسبه نور ایجاد شده در هر لایه ماده نورتاب پرداخته است. [8]

مواد و روش‌ها

در این پژوهش از روش چیدمانی برای ساخت این باتری استفاده شده است. به عنوان چشمه، رادیو ایزوتوپ Am-241 با فعالیت 1.1 mCi و Sr/Y90 با فعالیت 20 mCi مورد استفاده قرار گرفت. از ZnS:Cu به عنوان ماده فسفر، و یک PIN دیود سیلیکونی تجاری (شرکت هاماماتسو) و یک PIN دیود سیلیکونی بومی به عنوان نیمه رسانا استفاده شد. Am-241 یک گسیلنده آلفا و Sr/Y90 یک گسیلنده خالص بتا با نیمه عمرهای به ترتیب 432.2 و 28 (به ترتیب) سال میباشند. طیف این دو رادیو ایزوتوپ در جدول 1 و شکل 1 آمده است.



شکل 1 : طیف انرژی ذرات بتا Sr/Y90

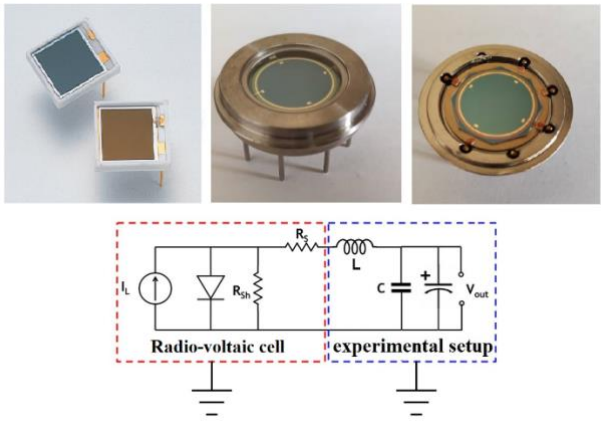
جدول 1: طیف ذرات آلفا چشمه **Am-241**

انرژی (KeV)	احتمال واپاشی (%)
5485.6	84.5
5442.8	13.0
5388.23	1.6

روش های شبیه سازی به تفصیل در کارهای قبلی ما مورد بحث قرار گرفته است [4،7]. از نرم افزار MCNPX برای محاسبه انرژی انباشت شده ذرات بتا و آلفا در لایه فسفر و نیمه رسانا و از نرم افزار MATLAB برای محاسبه شدت طیفی نور ساطع شده از لایه فسفر و زوج الکترون-حفره تولید شده در لایه سیلیکون برای محاسبه ولتاژ مدار باز و جریان مدار کوتاه استفاده شد.

در بخش تجربی، خمیر ZnS:Cu به روش دکتر بلید (blade) بر روی لام‌های شیشه‌ای قرار گرفت. در پژوهش های پیشین ضخامت‌های مختلفی مورد بررسی قرار گرفت (50، 100 و 150 میکرومتر) و در نهایت ضخامت 50 میکرومتر به دلیل محدودیت در ساخت و بیشینه ولتاژ خروجی و حداقل خودجزبی نسبت به دیگر ضخامت ها، انتخاب شد. برای اثر آلفاولتائیک ، دیسک Am-241 در بالای لایه فسفر قرار می گیرد و هر دو روی نیمه رسانا سیلیکونی (هاماماتسو) قرار می گیرند. و برای اثر بتاولتائیک Sr/Y90 بر روی نیمه رسانا بومی قرار میگیرد. برای اندازه گیری ولتاژ مدار باز از سلول، خروجی نیمه رسانا به یک فیلتر پایین گذر RLC (برای کاهش نویزها) متصل شد و سپس به اسیلوسکوپ وصل شد. ضخامت نیمه رسانا مورد استفاده برای اثر آلفاولتائیک 300 میکرومتر و از جنس سیلیکون تک کریستال تجاری (شرکت هاماماتسو)، و برای اثر بتاولتائیک از نیمه رسانای ساخت شده بومی از جنس سیلیکون تک کریستال و ضخامت 500 میکرومتر استفاده شد.

شکل زیر نمایی از این نیمه رساناها و فیلتر پایین گذر می‌باشد. به دلیل طراحی و ساخت این دستگاه در شرایط خاص و وجود محدودیت در ثبت تصویر چیدمان و مدل ساخته شده، امکان ارائه تصویر دستگاه ساخته شده را به ما نمیدهد.

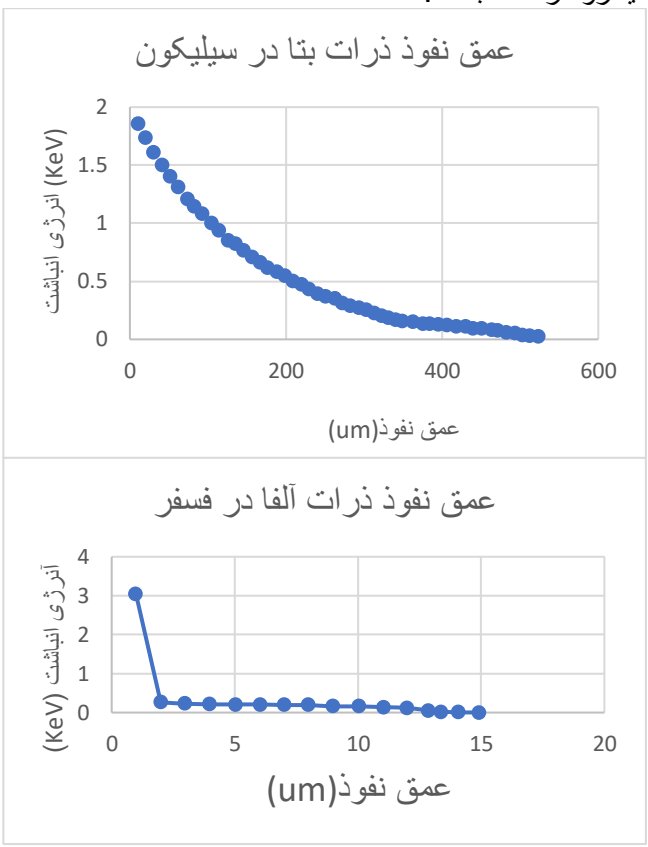


شکل 2. نمایی از نیمه رسانا هاماماتسو و نیمه رسانا بومی و فیلتر پایین گذر

نتایج و بحث

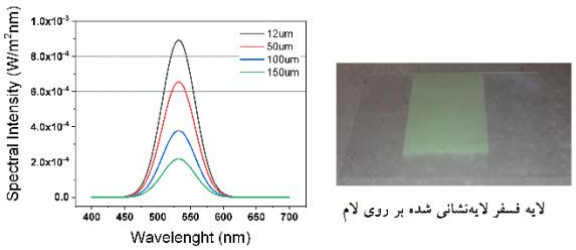
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

انرژی ذخیره شده ذرات آلفا در لایه ZnS:Cu و ذرات بتا در نیمه رسانا بومی در شکل 3 نشان داده شده است. همانطور که می توان مشاهده کرد حداکثر عمق نفوذ ذرات آلفا گسیل شده از Am-241 در ZnS:Cu 14 میکرومتر است. از طرفی عمق نفوذ ذرات بتا در سیلیکون به دلیل فعالیت ، انرژی بالا و اندرکنش ذرات بتا در تمام ضخامت 500 میکرومتری نیمه رسانا نفوذ کرده اند.
با افزایش ضخامت مواد فسفر و سیلیکون انرژی بیشتری در این مواد رسوب می‌کند، از طرفی ضخامت بیشتر باعث خودجذبی بیشتر فوتون‌های تولید شده در لایه فسفر و ذرات بتا می‌شود. ضخامت بهینه 12 میکرومتر در پژوهش های گذشته به دست آمد اما به دلیل محدودیت در روش دکتر بلید، ضخامت 50 میکرومتر انتخاب شد.



شکل 3. انرژی انباشت حاصل از ذرات آلفا و بتا در لایه فسفر و نیمه رسانا بومی

شکل زیر محاسبات شدت طیف نور تولید شده در ضخامت های مختلف و لایه فسفر لایه نشانی شده بر روی یک لام توسط نرم افزار MATLAB را نشان میدهد که همانطور که گفته شد بیشینه شدت در 12 میکرومتر می‌باشد اما به دلیل محدودیت های موجود ضخامت 50 میکرومتر انتخاب شد.



شکل 4. لایه فسفر لایه‌نشانی شده روی یک لام(سمت راست) و طیف نور ایجاد شده از این لایه (سمت چپ)

روش محاسبات ولتاژ مدار باز و جریان مدار کوتاه همانند پژوهش های گذشته بوده است. [4،7]
دو نیمه رسانا انتخاب شده در این طراحی به روش موازی در یک مدار بسته شد. نتایج ولتاژ و جریان خروجی در جدول زیر قابل مشاهده است.

جدول 2 نتایج نهایی باتری

	جریان مدار کوتاه(nA)	ولتاژ مدار باز(mV)
شبیه سازی	820	58.4
نتایج تجربی	800	55.4

نتایج نشاندهنده مطابقت محاسبات کد ترکیبی با نتایج عملی است.

نتیجه گیری

به طور خلاصه، یک باتری رادیوولتائیک دو اثره را بر اساس رادیوایزوتوپ Am-241 و لایه فسفر ZnS:Cu برای اثر آلفاولتائیک و رادیوایزوتوپ Sr/Y90 برای اثر بتاولتائیک طراحی، شبیه‌سازی و ساخته شد. نتایج شبیه سازی و تجربی با هم مقایسه شد و نشان از مطابقت آنها داشت. یک سلول از این باتری می تواند تا 55.4 میلی ولت و جریان 800 نانو آمپر را تامین کند و با ترکیب آرایه ای از این باتری به صورت سری می توان به ولتاژهای بالاتری دست یافت.

مرجع‌ها

[1] S. Harrison, "*Betavoltaic Devices*," Retrieved October, 22 .(2014)
[2] L. C. Olsen, P. Cabauy, and B. Elkind, "*Betavoltaic power sources*," Physics today, **65, 12, 35**.(2012)
[3] C. Eiting, V. Krishnamoorthy, S. Rodgers, T. George, J. D. Robertson, and J. Brockman, "*Demonstration of a radiation resistant, high efficiency SiC betavoltaic*," Applied Physics Letters, **88, 6, 064101**.(2006)
[4] Moayedi, H., Hajibaba, S., Afarideh, H., Ghergherehchi, M. and Mohamadian, M., 2021. "*Optimization of Beta Radioluminescent Batteries with Different Radioisotopes: A Theoretical Study. Nuclear Science and Engineering*", pp.**1-12**.
[5] Werner, Christopher J. "*MCNP User's Manual-Code Version 6.2.*" Los Alamos National Laboratory, Los Alamos.(2017)

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

[6]Etter, D.M., Kuncicky, D.C. and Hull, D.W., 2002. "*Introduction to MATLAB*". Prentice Hall.
[7] Hajibaba, S., Moayedi, H., Einian, M. and Etaati, Gh., 2021 "*Simulation and fabrication of a beta-radioluminescence nuclear battery using Sr/Y90*". 27th Nuclear Conference of Iran
[8] G. SAATSAKIS et al., "Optical Characteristics of ZnSulnS/Zns (Core/Shell) Nanocrystal Flexible Films Under X-Ray Excitation" Crystals **9,7,343**(2019);

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی خواص واپاشی آلفا و اعداد جادویی نوترونی در ناحیه هسته‌های فوق سنگین

ناصرقدسی، امید[۱] ؛ مقدری امیری، مرتضی[۱]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه مازندران، بابلسر

چکیده

در این مطالعه خواص واپاشی آلفا و اعداد جادویی نوترونی در ناحیه عناصر فوق سنگین با استفاده از روش دابل – فولدینگ مورد بررسی قرار گرفته شده است. برای مطالعه دقیق‌تر خواص واپاشی آلفای عناصر موجود در این ناحیه از توابع توزیع نوکلئونی حاصل از تئوری هارتری – فوک - بوگلیوبوف بر پایه نیروی اسکایرم بهینه شده OMGA استفاده شده است که برای بازتولید خواص هسته‌های فوق سنگین پارامترسازی شده است. همچنین، نیمه عمرهای بدست آمده در توافق خوبی با پیش‌بینی سایر مدل‌های تئوری می‌باشند. علاوه بر این، با بررسی صورت گرفته با استفاده از این نیرو بر روی گروه‌های ایزوتوپی با عدد اتمی ۱۰۶ تا ۱۱۰ اعداد جادویی نوترونی ۱۵۲ و ۱۶۲ را نشان می‌دهند.

واژه های کلیدی: *واپاشی آلفا، عناصر فوق سنگین، برهمکنش اسکایرم، روش دابل – فولدینگ.*

Exploring α decay properties and neutron magic number at the superheavy region

Naser Ghodsi, Omid[1]; Moghaddari Amiri, Morteza[1]

[1]Department of Physics, Faculty of Science, University of Mazandaran, Babolsar

Abstract

In this study, α decay properties and neutron magic numbers at the superheavy region are investigated through the double-folding formalism. To have a precise investigation, the nucleon density distributions calculated by self-consistent Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) calculation are employed based on the OMGA Skyrme interactions optimized to reproduce the properties of superheavy nuclei. Also, the obtained half-lives are consistent with predictions of other theoretical models. Furthermore, the analysis of the isotopic groups with $106 \leq Z \leq 110$ *obtained by OMGA Skyrme interaction indicates the neutron magic numbers 152 and 162.*

***Keywords**: Alpha decay, Superheavy nuclei, Skyrme interaction, double-folding formalism.*

PACS No. 25

مقدمه

در دهه اخیر، بررسی خواص عناصر سنگین و فوق سنگین توسط مطالعه خواص واپاشی آلفا توجه بسیاری را به خود جلب نموده است [۱, ۲]. برای شناخت عناصر جدید، مطالعه واپاشی آلفا امری غیرقابل انکار می‌باشد زیرا واپاشی آلفا یکی از مدهای مهم واپاشی در عناصر سنگین و فوق سنگین می‌باشد که می‌تواند اطلاعات قابل اتکایی در مورد خواص حالت پایه هسته‌ها از قبیل انرژی بستگی، نیمه عمر، انرژی واپاشی، اسپین و پاریته را به همراه داشته باشد [۳].

علاوه بر این، با استفاده از نیروهای متعدد اسکایرم شناخت خوبی از ساختارهای هسته‌ای می‌تواند حاصل شود که این نیروها توصیف منحصر به فرد خودشان را از خواص ماده هسته‌ای به همراه دارند [۴]. متعاقبا، تئوری هارتری – فوک – بوگلیوبوف بر پایه نیروهای اسکایرم به منظور شناخت هرچه بهتر خواص حالت پایه هسته‌ها توسعه داده شده است که انرژی جفت شدگی بین نوکلئون‌ها را به طور همزمان در نظر میگیرد [۵]. لازم به ذکر است که این سبک از مطالعات در راستای بازتولید نتایج تجربی توسعه می‌یابند. از این رو، خواص هسته‌ای مانند انرژی بستگی، شعاع‌های پروتونی، نوترونی و باری و توابع توزیع نوکلئونی که از تئوری

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

هارتری – فوک – بوگلیوبوف بر پایه نیروهای اسکایرم حاصل می‌شوند تا حد امکان قابل اتکا می‌باشند.

از طرفی دیگر، تعیین پتانسیل برهم‌کنشی نقش بسیار مهمی را در مطالعاتی که در حوزه هم‌جوشی و واپاشی صورت می‌پذیرند را ایفا میکند. تاکنون، فرمالیسم‌های متعددی برای محاسبه پتانسیل برهم‌کنشی ارائه شده است که برای مثال می‌توان به مدل قطره مایع، مدل پتانسیل مجاورت و مدل‌های وابسته به چگالی به مانند فرمالیسم دابل – فولدینگ اشاره نمود [۶, ۷]. در این میان، با در نظرگیری داده‌های پراکندگی آلفا، پتانسیل برهم‌کنشی حاصل از روش وابسته به چگالی دابل – فولدینگ به همراه توابع توزیع واقع گرایانه‌تری که از تئوری هارتری – فوک – بوگلیوبوف بر پایه نیروهای اسکایرم می‌توانند حاصل شوند، یکی از کاندیدهای مناسب جهت توصیف فرآیند واپاشی آلفا و مطالعه خواص عناصر سنگین و فوق سنگین می‌تواند باشد.

محاسبات و نتایج

واپاشی آلفا یک فرآیند تونل‌زنی کوانتومی می‌باشد که از سد پتانسیل هسته مادر عبور می‌کند. پتانسیل برهم‌کنشی کل به صورت زیر تعیین می‌شود:

$$V(r) = V_C(r) + V_N(r) + V_L(r). \qquad (۱)$$

که $V_C(r)$، $V_N(r)$ و $V_L(r)$ به ترتیب پتانسیل کولنی، پتانسیل هسته‌ای و پتانسیل حاصل از سهم اندازه حرکت مداری می‌باشند. در این مطالعه پتانسیل هسته‌ای از طریق درآمیختن چگالی‌های آلفا و هسته دختر با نیروهای موثر نوکلئونی محاسبه شده‌اند:

$$V_N(r) = \lambda \iint \rho_\alpha(r_\alpha)\, V_{eff}(E,\rho)\, \rho_d(r_d)\, d^3r_\alpha\ d^3r_d. \qquad (۲)$$

که ρ_α چگالی هسته آلفا و ρ_d چگالی هسته دختر می‌باشند که با استفاده از تئوری هارتری – فوک – بوگلیوبوف بر پایه نیروی اسکایرم محاسبه شده‌اند. همچنین، $V_{eff}(E,\rho)$ نیز نیروهای موثر نوکلئون – نوکلئون $M3Y$ می‌باشد که در بخش تبادلی از تقریب برد – صفر استفاده شده است. پارامتر قدرت پتانسیل λ در رابطه۲ به گونه‌ای انتخاب می‌شود که بتواند انرژی تجربی واپاشی آلفا را تحت شرط کوانتومی بوهر- سامرفیلد زیر بازتولید نماید [۸]:

$$\int_{r_1}^{r_2} k(r)\, dr = (G - L + 1)\frac{\pi}{2}\,. \qquad (۳)$$

عدد کوانتومی جهانی G از شرط ویلدروث حاصل می‌شود [۹]:

$$G = 2N + L = \sum_{i=1}^{4}(2n_i + l_i) = \sum_{i=1}^{4} g_i. \qquad (۴)$$

نیمه عمر واپاشی آلفا از رابطه $T_{1/2}=\hbar \ln 2 /\Gamma_\alpha$ محاسبه می‌شود که در این رابطه Γ_α پهنای واپاشی آلفا است و با استفاده از روش گورویتز طی رابطه زیر

$$\Gamma_\alpha = P_\alpha F \frac{\hbar^2}{4\mu} \exp\left[-2\int_{r_2}^{r_3} k(r)dr\right], \qquad (۵)$$

محاسبه می‌شود [۱۰]. P_α احتمال پیش تشکیل آلفا در درون هسته مادر می‌باشد که در این مطالعه مقادیر آن برای هسته‌های مدنظر از مدل خوشه‌ای محاسبه شده است [۱۱]. همچنین، در این رابطه F ضریب بهنجارش می‌باشد که از شرط زیر حاصل می‌شود:

$$F\int_{r_1}^{r_2} \frac{dr}{k(r)} = 1, \qquad (۶)$$

در روابط فوق r_1، r_2 و r_3 نقاط بازگشتی می‌باشند که از شرط $V(r) = Q_\alpha$ مشخص می‌شوند. همچنین، $k(r)$ عدد موج می‌باشد که از رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$k(r) = \sqrt{\tfrac{2\mu}{\hbar^2}\left|V(r) - Q_\alpha\right|}\,. \qquad (۷)$$

که $\mu = m_\alpha m_d/(m_\alpha + m_d)$ جرم کاهش یافته می‌باشد.

از طرفی با توجه به ساختار ناپایدار هسته‌های فوق سنگین، انتخاب یک میدان متوسط مناسب از اهمیت بالایی برخوردار می‌باشد. برهم‌کنش‌های اسکایرم در اصل برای هسته‌های محدود معرفی می‌شوند. این تحقیق بر پایه لزوم استفاده از یک نیروی برهم‌کنشی مناسب در ناحیه فوق سنگین بنا نهاده شده است. طبق پژوهشی که اخیرا صورت گرفته است، نیروی اسکایرم OMGA را معرفی نموده‌ایم که پارامترهای این نیرو به گونه‌ای بهینه سازی شده‌اند که

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

به طور همزمان توصیف دقیقی از خواص ماده هسته‌ای نامحدود را داشته و از طرفی خواص ماده هسته‌ای محدود (هسته‌ها) از قبیل انرژی بستگی و شعاع باری آن‌ها را بازتولید نماید، (شکل۱ از مرجع [۱۲]). لذا در این مطالعه از نیروی بهینه شده OMGA برای ناحیه مدنظر استفاده شده است. از طرفی، پارامترهای نیروی اسکایرم با خواص ماده هسته‌ای محدود و نامحدود در ارتباط می‌باشند. انرژی به ازای هر ذره برای ماده هسته‌ای نامحدود بر حسب کسر پروتونی $\eta = Z/A$ به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$E_A = \frac{3\hbar^2}{10m}K_F^2 H_{5/3} + \frac{t_0}{4}\rho\left[(x_0+2) - \left(x_0+\frac{1}{2}\right)H_2\right] + \frac{t_3\rho^{\sigma+1}}{24}\left[(2t_1+2t_2+t_1x_1+t_2x_2)\rho H_{5/3} + \left(\frac{t_2}{2}-\frac{t_1}{2}+t_2x_2-t_1x_1\right)\rho H_{8/3}\right] \quad (۸)$$

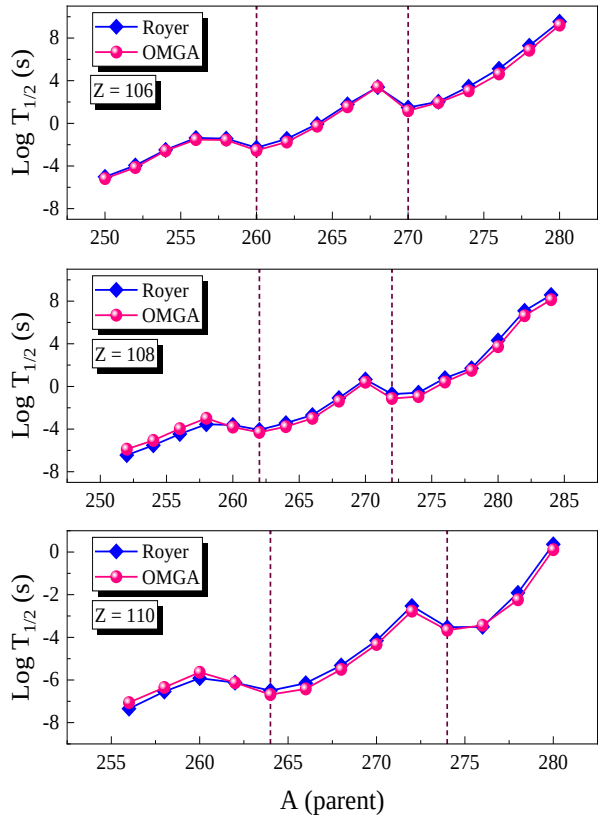
که $K_F = (3\pi^2\rho/2)^{1/3}$ و $H_n(\eta) = 2^{n-1}[\eta^n + (1-\eta)^n]$ می‌باشند. همچنین $\rho = \rho_\pi + \rho_\nu$ چگالی هسته‌ای و پارامترهای t_0، t_1، t_2، t_3، x_0، x_1 و x_2 پارامترهای برهم‌کنش نیروی اسکایرم می‌باشد. لازم به ذکر است که در چگالی اشباع E_0 مقدار انرژی به ازای هر ذره کمینه می‌شود.

تراکم ناپذیری ماده هسته‌ای مربوط به ماده هسته‌ای نامحدود در چگالی اشباع به صورت $K = 9\rho^2\partial^2 E_A/\partial\rho^2$ محاسبه می‌شود. به منظور درک بهتر توانایی این نیرو، چگونگی بازتولید خواص ماده هسته‌ای نامحدود توسط آن در جدول۱ ارائه شده است.

جدول۱: خواص ماده هسته‌ای حاصل از نیروی OMGA.

	OMGA
$\rho_0\ (fm^{-3})$	۰/۱۵۶
E_0 (MeV)	-۱۵/۸۰۰
K (MeV)	۲۴۶/۸۰۳

با توجه به نتایج حاصل در پژوهش اخیر، نشان داده شده است که نیروی بهینه شده OMGA توانایی مناسبی در توصیف خواص حالت پایه هسته‌ها در ناحیه مدنظر را دارا می‌باشد [۱۲]. از این رو، در این مطالعه برای محاسبه پتانسیل برهم‌کنشی از توابع توزیع نوکلئونی این نیرو برای پیش‌بینی نیمه‌عمرهای واپاشی آلفای هسته‌های واقع در ناحیه مدنظر استفاده شده است. متعاقبا، نیمه‌عمرهای متناظر با نیروی OMGA برای گروه‌های ایزوتوپی با عدد اتمی ۱۰۶ تا ۱۱۰ در شکل۱ نشان داده شده‌اند. برای ارزیابی بهتر، نیمه‌عمرهای محاسبه شده را می‌توان با مقادیری که از رابطه برازش یافته Royer بر مقادیر نیمه‌عمرهای تجربی برای هسته‌های موجود در جزایر پایداری استخراج شده‌اند، مقایسه نمود که مقادیر حاصل در شکل۱ ارائه شده‌اند [۱۳]. نتایج ارائه شده در این شکل توافق مناسبی بین پیش‌بینی نیمه‌عمرهای حاصل از OMGA و رابطه نیمه تجربی Royer را نشان می‌دهند. علاوه بر این، در شکل۱ می‌توان به خوبی تاثیرات رفتار لایه‌ای را در نیمه‌عمرهای محاسبه شده مشاهده نمود که اعداد جادویی نوترونی ۱۵۲ و ۱۶۲را پیش‌بینی می‌نمایند [۱۴, ۱۵].



شکل۱: نیمه عمر واپاشی آلفای محاسبه شده توسط نیرو OMGA و رابطه نیمه تجربی Royer؛ خط‌چین‌ها اعداد جادویی ۱۵۲ و ۱۶۲ را در ناحیه فوق سنگین پیش‌بینی می‌کنند.

همچنین، رفتار نیمه‌عمرهای ارائه شده در شکل۱ ناشی از تغییر ایزواسپین سطح در اثر تغییر تعداد نوترون‌ها در لایه‌های سطحی

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

است که این عدم تقارن بر روی احتمال پیش تشکیل و گسیل آلفا تاثیرگذار می‌باشد [۳]. علاوه بر این، کمینه شدن نیمه عمر در اعداد نوترونی ۱۵۲ و ۱۶۲ به دلیل لایه‌های بسته نوترونی می‌باشد که این رفتار به صورت مشابه در اطراف اعداد نوترونی شناخته شده ۸۲ و ۱۲۶ نیز گزارش شده است [۱۶].

نتیجه گیری

در این مطالعه خواص واپاشی آلفا و اعداد جادویی نوترونی در ناحیه عناصر فوق سنگین با استفاده از روش دابل – فولدینگ مورد بررسی قرار گرفته شده است. برای مطالعه خواص واپاشی آلفای عناصر این ناحیه از توابع توزیع نوکلئونی حاصل از تئوری هارتری – فوک - بوگلیوبوف بر پایه نیروی اسکایرم OMGA استفاده شده است. بازتولید مناسب خواص ماده هسته‌ای نامحدود و محدود (هسته‌ها) توسط نیرو OMGA منتهی به این نتیجه شده است که انتخاب یک میدان متوسط مناسب می‌تواند توصیف واقع گرایانه تری از خواص حالت پایه هسته‌های مدنظر را به همراه داشته باشد. لذا، خواص هسته‌ای مانند انرژی بستگی، شعاع‌های پروتونی، نوترونی و باری و توابع توزیع آن‌ها که از تئوری هارتری – فوک – بوگلیوبوف بر پایه نیروهای اسکایرم OMGA حاصل می‌شوند تا حد امکان قابل اتکا می‌باشند. متعاقبا، نیمه عمر واپاشی آلفای هسته‌های فوق سنگین با استفاده از پتانسیل برهمکنشی حاصل از روش دابل – فولدینگ و توابع توزیع حاصل از نیرو اسکایرم OMGA تخمین زده شدند که در تطابق خوبی با پیش‌بینی سایر مدل‌های تئوری می‌باشند. علاوه بر این، با بررسی رفتار نیمه‌عمرهای گروه‌های ایزوتوپی، تاثیرات آشکار رفتار لایه‌ای در نیمه عمرهای حاصل مشاهده شده است که اعداد جادویی نوترونی ۱۵۲ و ۱۶۲را پیش‌بینی می‌نمایند.

مرجع‌ها

[1] P. Mohr, "α-decay properties of 118 296 from double-folding potentials," *Physical Review C*, vol. 95, no. 1, p. 011302, 2017.

[2] K. Anjali, K. Prathapan, and R. Biju, "Studies on the emission of various exotic fragments from superheavy nuclei via cluster decay process," *Nuclear Physics A*, vol. 993, p. 121644, 2020.

[3] W. Seif, G. Adamian, N. Antonenko, and A. Hashem, "Correlations of α-decay properties and isospin-asymmetry," *Physical Review C*, vol. 104, no. 1, p. 014317, 2021.

[4] M. Dutra, O. Lourenço, J. S. Martins, A. Delfino, J. R. Stone, and P. Stevenson, "Skyrme interaction and nuclear matter constraints," *Physical Review C*, vol. 85, no. 3, p. 035201, 2012.

[5] M. Centelles, X. Roca-Maza, X. Vinas, and M. Warda, "Origin of the neutron skin thickness of Pb 208 in nuclear mean-field models," *Physical Review C*, vol. 82, no. 5, p. 054314, 2010.

[6] J. Błocki, J. Randrup, W. Świątecki, and C. Tsang, "Proximity forces," *Annals of Physics*, vol. 105, no. 2, pp. 427-462, 1977.

[7] G. R. Satchler and W. G. Love, "Folding model potentials from realistic interactions for heavy-ion scattering," *Physics Reports*, vol. 55, no. 3, pp. 183-254, 1979.

[8] B. Buck, J. Johnston, A. Merchant, and S. Perez, "Cluster model of α decay and Po 212," *Physical Review C*, vol. 53, no. 6, p. 2841, 1996.

[9] K. Wildermuth, *A unified theory of the nucleus*. Springer-Verlag, 2013.

[10] S. A. Gurvitz and G. Kalbermann, "Decay width and the shift of a quasistationary state," *Phys Rev Lett*, vol. 59, no. 3, pp. 262-265, Jul 20 1987, doi: 10.1103/PhysRevLett.59.262.

[11] S. M. S. Ahmed, R. Yahaya, S. Radiman, and M. S. Yasir, "Alpha-cluster preformation factors in alpha decay for even–even heavy nuclei using the cluster-formation model," *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, vol. 40, no. 6, p. 065105, 2013.

[12] O. Ghodsi and M. Amiri, "Exploring α decay properties in the superheavy region through the double-folding formalism and Skyrme interactions," *Physical Review C*, vol. 104, no. 4, p. 044618, 2021.

[13] G. Royer, "Alpha emission and spontaneous fission through quasi-molecular shapes," *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, vol. 26, no. 8, p. 1149, 2000.

[14] M. Ismail, W. Seif, and A. Abdurrahman, "Relative stability and magic numbers of nuclei deduced from behavior of cluster emission half-lives," *Physical Review C*, vol. 94, no. 2, p. 024316, 2016.

[15] M. Ismail, W. Seif, A. Adel, and A. Abdurrahman, "Alpha-decay of deformed superheavy nuclei as a probe of shell closures," *Nuclear Physics A*, vol. 958, pp. 202-210, 2017.

[16] J.-G. Deng, J.-C. Zhao, P.-C. Chu, and X.-H. Li, "Systematic study of α decay of nuclei around the Z= 82, N= 126 shell closures within the cluster-formation model and proximity potential 1977 formalism," *Physical Review C*, vol. 97, no. 4, p. 044322, 2018.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی پراکندگی کشسان $^{12}C + ^{12}C$ با استفاده از برهمکنش حاصل از روش LOCV درچارچوب مدل ادغامی

رحمت ،مرضیه [۱] ؛ مدرس ، مجید [۲]

[۱] گروه فیزیک ، دانشگاه زنجان ، زنجان
[۲] دانشکده فیزیک، پردیس علوم، دانشگاه تهران، تهران

چکیده

با استفاده از روش LOCV ، مؤلفه‌های مستقیم و تبادلی برهم‌کنش مؤثر میانگین وابسته به چگالی، برای ماده هسته‌ای متقارن با پتانسیل ورودی رایدR۶۸ استخراج شده است. بخش‌های شعاعی و وابسته به چگالی این پتانسیل به منظور استفاده در مدل ادغامی و توصیف پراکندگی کشسان یون‌های کربن از هم تفکیک شده است.

واژه های کلیدی: *مدل ادغامی، پراکندگی الاستیک، روش LOCV*

$^{12}C + ^{12}C$ elastic scattering folding analysis using the LOCV average effective interaction

Rahmat , marzieh [1]; Modarres, Majid [2]

[1] Department of Physics, University of Zanjan,Zanjan,
[2] Department of Physics, University of Tehran,Tehran

Abstract

We derived the direct and exchange component of the averaged effective two-body interaction of LOCV for symmetric nuclear matter by using the Reid68 as input potential. In order to use this interaction in the folding model and describe HI scattering we have separated the radial part and the density- dependent part of the LOCV interaction.

***Keywords**: folding model, elastic scattering, LOCV method*
PACS No. 20

مقدمه

در بسیاری از واکنش‌های هسته‌ای، پتانسیل هسته- هسته، یک کمیت کلیدی است، برای مثال در پراکندگی کشسان α-هسته، سیستم‌های یون سنگین(HI) و واکنش‌های گداخت. با توجه به اینکه پتانسیل کولنی بین دو هسته را بطور دقیق می‌توان تعیین کرد، مساله اصلی محاسبه پتانسیل هسته‌ای می‌باشد بسیاری از سیستم‌های HI توسط پارامترایز تجربی پتانسیل هسته‌ای توصیف می‌شوند، معمولا فرم‌های پدیده‌شناختی وودز-سکسون[۱] هم برای بخش حقیقی و هم برای بخش موهومی پتانسیل اپتیکی بکار می‌رود. اما مطلوب است که پتانسیل هسته- هسته را به پتانسیل نوکلئون- نوکلئون(NN) مرتبط کنیم. در همین راستا پتانسیل مدل ادغامی[۲] ، به عنوان بخش حقیقی پتانسیل اپتیکی، به‌طور وسیعی برای توصیف

[1] Woods-Saxon

[2] Folding Models

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

پراکندگی HI بکار برده شده است. در این روش پتانسیل از ادغام یک برهم‌کنش مؤثر نوکلئون – نوکلئون روی توزیع چگالی حالت پایه دو هسته تولید می‌شود. پتانسیل‌های مدل ادغامی، به علت کاربرد ساده در محاسبات عددی، بطور وسیعی استفاده می‌شوند.

دو کمیت ورودی مهم در محاسبات ادغامی، چگالی‌های دو هسته برهمکنش کننده و برهمکنش مؤثر NN می‌باشد. معمولا چگالی‌های هسته‌ای را بطور دقیق می‌توان از مدل‌های هسته‌ای تعیین کرد، اما برهمکنش مؤثر NN مناسب برای استفاده در مدل ادغامی، هنوز مورد کنکاش است. در این کار ما قصد داریم از مؤلفه‌های مستقیم و تبادلی برهمکنش مؤثر میانگین وابسته به چگالی روش LOCV (LOCV AEI)،به عنوان برهمکنش مؤثر NN، در مدل ادغامی استفاده کنیم.

پتانسیل مدل ادغامی

در مرتبه اول نظریه بس‌ذره‌ای، پتانسیل هسته- هسته میکروسکوپی را می‌توان به عنوان یک پتانسیل هارتری- فوک گونه پادمتقارن برای سیستم‌های هسته‌ای به‌صورت زیر ارزیابی کرد[۱]:

$$U_F = U_D + U_{EX} = \sum_{i\epsilon A_1, j\epsilon A_2} [\langle ij|V_D|ij\rangle + \langle ij|V_{EX}|ji\rangle] \quad (۱)$$

که $|i\rangle$و$|j\rangle$ توابع موج نوکلئون‌ها در دو هسته برخوردی A_1 و A_2 و V_D و V_{EX} بخش‌های مستقیم و تبادلی برهمکنش‌های NN مؤثر هستند. با معرفی ماتریس چگالی تک ذره‌ای $\rho_{1(2)}(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ بین دو هسته‌ی برخوردکننده، می‌توانیم مؤلفه‌های مستقیم و تبادلی پتانسیل ادغامی را بصورت زیر بنویسیم:

$$U_D(E,R) = \iint d^3r_1\, d^3r_2 V_D(\rho,E,r)\rho_1(r)\rho_2(r) \quad (۲)$$

و

$$U_{EX}(E,R) = \iint d^3\vec{r_1}\, d^3\vec{r_2} V_{EX}(\rho,E,r)\rho_1(\vec{r_1},\vec{r_1}+\vec{s})\rho_2(\vec{r_2},\vec{r_1}-\vec{s})e^{(ik_{rel}(R).\vec{s}/A_{red})} \quad (۳)$$

که $k_{rel}(R)$ تکانه‌ی حرکت نسبی است.

$$K_{rel}{}^2(R) = 2m_n A_{red}[E_{c.m.} - U(E,R) - V_C(R)]/\hbar \quad (۴)$$

که $A_{red} = \frac{A_P A_t}{A_P + A_t}$ عدد جرمی کاهیده و m_n جرم واقعی نوکلئون است. $E_{c.m.}$ انرژی مرکز جرم و E انرژی پرتابه در چارچوب آزمایشگاه می‌باشد. در رابطه فوق $U(E,R) = U_D(E,R) +$ $U_{EX}(E,R)$ پتانسیل هسته‌ای کل و $V_C(R)$ پتانسیل کولنی است.

تاکنون از برهمکنش‌های NN گوناگونی به عنوان برهمکنش مؤثر در مدل ادغامی استفاده شده است که از جمله می‌توان به برهمکنش‌های $\mathrm{M3}Y-Reid$ و $\mathrm{M3}Y-Paris$ اشاره کرد[۲] که بخش مستقیم وتبادلی آنها در مرجع [۲] تعریف شده‌اند. برای اینکه توصیف بهتری از پراکندگی HI ، با استفاده از این برهم‌کنش‌ها بدست بیاید، برهم‌کنش اصلی M3Y در یک عامل وابسته به چگالی و یک عامل وابسته به انرژی ضرب می‌شود و فرض بر این است که بخش شعاعی و بخش وابسته به چگالی و عامل وابسته به انرژی مستقل از همدیگر باشند:

$$V_{D(EX)}(\rho,E,r) = g(E)f(\rho)V_{D(EX)}(r) \quad (۵)$$

در واقع هیچ توجیه تئوری برای این فاکتوربندی وجود ندارد و صرفا برای سازگاری با نتایج تجربی در نظر گرفته شده است[۲].

تابع $f(\rho)$ وابستگی‌های مختلف پتانسیل به چگالی را نشان می‌دهد. وابستگی پتانسیل به انرژی را با تابع $g(E)$ را نشان می‌دهد. که به‌طور خطی به‌صورت $g(E) = (1 - \gamma\left(\frac{E}{A}\right))$ در نظر گرفته می‌شود. شکل‌های متنوعی برای $f(\rho)$ پیشنهاد شده است که شامل پارامترهایی است که بطور پدیده‌شناختی تعیین می‌شوند. ما در این کار قصد داریم از برهم‌کنش مؤثر میانگین وابسته به چگالی LOCV در مدل ادغامی استفاده کنیم که در بخش بعد به معرفی آن می‌پردازیم.

ما در محاسباتمان توزیع چگالی را به‌صورت توزیع دو پارامتری فرمی در نظر گرفته‌ایم:

$$\rho(r) = \frac{-\rho_0}{(1 + exp(\frac{r - R_v}{a_v}))} \quad (۶)$$

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

که پارامترهای R_v, ρ_0 و a_v به‌ترتیب چگالی اشباع، شعاع و پخشیدگی سطحی را از مرجع [۳] در محاسبات وارد کرده‌ایم.

با محاسبه بخش‌های مستقیم و تبادلی پتانسیل ادغامی می‌توان بخش حقیقی پتانسیل اپتیکی، که توصیف کننده پراکندگی یون‌های سنگین است، را محاسبه کنیم. پتانسیل اپتیکی شامل یک جمله موهومی نیز می‌باشد که از جفت شدگی کانال‌های غیرالاستیک ناشی می‌شود و معمولا به فرم پد یده‌شناختی، وودز-ساکسون(WS+WSD)، در نظر گرفته می‌شود [۱]:

$$U(E,R) = N_R[U_D(R) + U_{EX}(E,R)] - iW_V\left(1 + exp(\frac{r-R_V}{a_V})\right) + 4iW_D a_D \frac{d}{dR}\left(1+\exp\left(\frac{r-R_D}{a_D}\right)\right)^{-1-1} \quad (۷)$$

ضریب بهنجارش N_R و و پارامترهای بخش موهومی طوری تنظیم می‌شوند که بهترین برازش برای داده‌های پراکندگی HI حاصل شود

سپس با داشتن پتانسیل‌های ادغامی می‌توان سطح مقطع پراکندگی کشسان $^{12}C + ^{12}C$ را در زوایای مختلف بدست آورد.

برهمکنش مؤثر روش LOCV

درروش LOCV می‌توان بخش‌های مستقیم(LOCV AEID) و تبادلی (LOCV AEIE) برهمکنش‌های مؤثر میانگین وابسته به چگالی را برای ماده‌ی هسته‌ای استخراج نمود. به‌عنوان یک پتانسیل هارتری – فوک گونه با استفاده از برهمکنش‌های مؤثر دو ذره‌ای $w_2(12)$ به‌صورت زیر بیان می‌شود[۶-۴]:

$$\bar{v}_D^{LOCV} + \bar{v}_{EX}^{LOCV} = \sum_{ij}[\langle ij|w_2(12)|ij\rangle - \langle ij|w_2(12)|ji\rangle] \quad (۸)$$

ما از پتانسیل رایدِ، به عنوان برهمکنش‌ورودی استفاده کرده‌ایم. پس از انجام پاره‌ای از محاسبات جبری بخش‌های مستقیم و تبادلی را به صورت را می توانیم به صورت زیر بنویسیم:

$$\bar{V}_D(r,\rho) \quad (۹)$$

$$= \frac{\sum_{\alpha,i,j}(2T+1)(2J+1)\frac{1}{2}\mathcal{V}_\alpha^{i,j}(r,\rho)a_\alpha^{(1)^2}(r,\rho)}{\sum_{\alpha,k}(2T+1)(2J+1)\frac{1}{2}a_\alpha^{(k)^2}(r,\rho)}$$

$$\bar{V}_{EX}(r,\rho) = \frac{\sum_{\alpha,i,j}(2T+1)(2J+1)\left[\frac{(-1)^{L+S+T}}{2}\right]\mathcal{V}_\alpha^{j,k}(r,\rho)a_\alpha^{(i)^2}(r,\rho)}{\sum_{\alpha,k}(2T+1)(2J+1)\left[\frac{(-1)^{L+S+T}}{2}\right]a_\alpha^{(1)^2}(r,\rho)} \quad (۱۰)$$

به منظور استفاده از این برهم‌کنش‌ها در مدل ادغامی، برهمکنش‌های LOCV AEID و LOCV AEIE به‌صورت حاصل‌ضرب یک بخش وابسته به شعاع و یک بخش وابسته به چگالی به‌صورت زیر بیان‌می‌شود:

$$\bar{v}_{D(EX)}^{LOCV}(r,\rho) = v_{D(EX)}(r)F_{D(EX)}(\rho) \quad (۱۱)$$

تمام وابستگی به چگالی در $F_{D(EX)}(\rho)$ نهفته است و $v_{D(EX)}(r)$ به نحوی برازش می‌شود، که شکل شعاعی $\bar{v}_{D(EX)}^{LOCV}$ را به‌طور تقریبی بازتولید کند. شکل‌های متنوعی برای $F_{D(EX)}(\rho)$ می‌تواند بکار رود که معادله حالت ماده هسته‌ای متقارن(SNM) بدست آید اما مناسب‌ترین شکلی که هم معادله حالت SNM را بازتولید کند و هم بتواند در مدل ادغامی بکار رود، فرم وابستگی نمایی به چگالی می‌باشد:

$$F_{D(EX)}(\rho) = C(1+\exp(-\beta\rho)) \quad (۱۲)$$

که ρ در برهمکنش‌های LOCV در محاسبات ماده‌ی هسته‌ای، چگالی ماده‌ی هسته‌ای است. اما در محاسبات مدل ادغامی ρ برهم‌نهی چگالی‌های هسته و پرتابه است. پارامترهای مختلف $F_{D(EX)}(\rho)$ برای برهمکنش ورودی رایدِ در مرجع (۵) آمده است. حال می‌توان $\bar{v}_D^{LOCV}$ و $\bar{v}_{EX}^{LOCV}$ باز فرمول‌بندی شده را می‌توان در معادلات (۱) و (۲) برای محاسبه بخش مستقیم U_D و تبادلی U_{EX} پتانسیل‌های اپتیکی HI در نظر گرفت.

هنگام کاربرد LOCV AEI به داده‌های پراکندگی هسته- هسته، لازم است یک فاکتور صریح وابستگی به انرژی نیز در محاسباتمان

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

در نظر بگیریم به گونه‌ای که بهترین برازش به داده‌های پراکندگی حاصل شود. با در نظر گرفتن فرم‌های مختلف برای این تابع، ما دریافته‌ایم که این فاکتور می‌تواند بصورت یک وابستگی خطی به انرژی پرتابه در نظر گرفته شود.

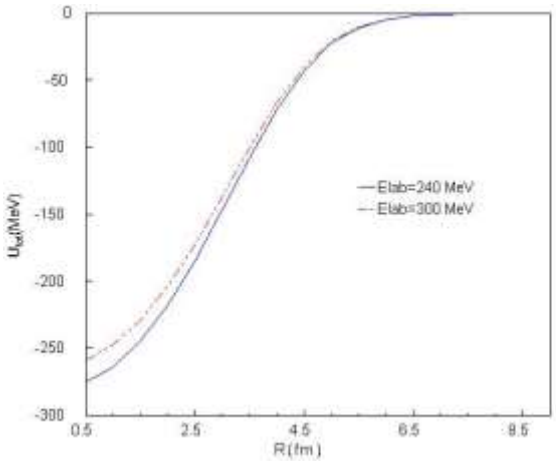
$$g(E) = 0.5 - 0.0015(E/A) \qquad (۱۳)$$

جدول۱: پارامترهای بخش موهومی پتانسیل اپتیکی

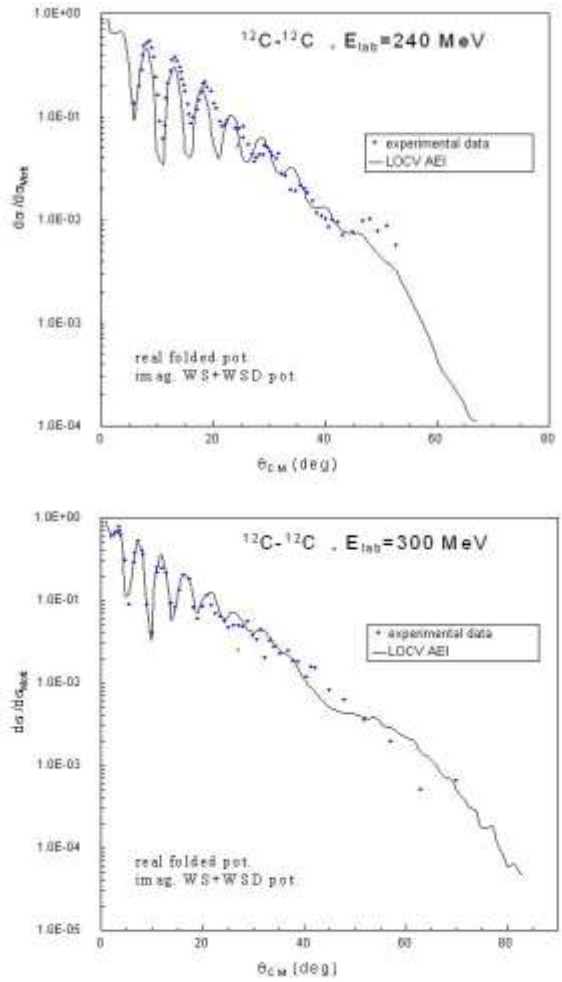
E_{lab}	W_V	R_V	a_V	W_D	R_D	a_D
240 MeV	-28.9	5.30	0.68	-8.44	2.89	0.42
300 MeV	-31.8	4.94	0.73	-5.44	0.61	0.63

در شکل (۱) پتانسیل ادغامی محاسبه شده با استفاده ازبرهمکنش مؤثر میانگین LOCV با در نظر گرفتن وابستگی چگالی به‌صورت نمایی برای سیستم $^{12}C + ^{12}C$ در انرژی‌های $E_{lab} =$ $240, 300\ MeV$ نشان داده‌ایم.

سپس با به دست آوردن پتانسیل‌های ادغامی در چارچوب LOCV و تنظیم پارمتراهای بخش موهومی بصورت WS+WSD در رابطه (۷)، بصورت پدیده‌شناختی،(جدول ۱)، سطح مقطع پراکندگی الاستیک را برای سیستم $^{12}C + ^{12}C$ در انرژی‌های میانی $E_{lab} =$ $240, 300\ MeV$ به‌دست‌آورده‌ایم (شکل‌های ۲ و ۳را ببنید).



شکل ۱: پتانسیل ادغامی با استفاده ازبرهمکنش LOCV AEI. برای سیستم $^{12}C + ^{12}C$



شکل ۲ :سطح‌مقطع پراکندگی الاستیک $^{12}C + ^{12}C$ در انرژی$= E_{lab}$ $250, 350\ MeV$ با استفاده ازبرهمکنش LOCV AEI . نقاط توپر داده‌های تجربی می‌باشد.

نتیجه گیری

چنانچه ملاحظه می‌شود با تعریف مناسبی از مؤلفه‌های مستقیم و تبادلی برهم‌کنش مؤثر میانگین در چارچوب روش میکروسکوپی LOCV می‌توان توصیف کیفی خوبی از پراکندگی HI ها بدست آورد. برهمکنش‌های LOCV از یک روش کاملا میکروسکوپی استخراج شده است و بجز پارامترهای مربوط به بخش موهومی، پارامتر آزاد دیگری در محاسبات ما وارد نمی‌شود.

مرجع‌ها

[1] Dao T. Khoa, W. von Oertzen, H. G. Bohlen.Phs Rev C.49 3 (1994)
[2] G. R. Satchler and W. G. Love *Phys. Rep.*55 183 (1979).
[3] M. El-Azab Farid and G.R. Satchler, Nucl. Phys. A438, 525 (1985)
[4] M. Modarres and M. Rahmat, *Nucl. Phys. A*, 934 (2015) 148
[5] M. Rahmat, M. Modarres, Phys. Rev. C 97 (2018) 034611.
[6] M. Modarres and M. Rahmat, *Nucl. Phys. A*, 997(2020)

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی آرایه‌های متناوب نانوحفره و نانو لوله از جنس طلا و نقره

رئیسی، شایسته1؛ صاحبسرا، پیمان2

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان

چکیده

از جذاب ترین خصوصیات نانوذرات فلزی، ویژگی های اپتیکی آن ها است که به نسبت اندازه، شکل و جنس نانوذرات و همچنین محیط اطراف نانوذره متغیر است. وقتی فلزات وارد حوزه ی نانو می‌شوند خواص اپتیکی و نوری پیچیده و متنوعی را از خودشان نشان می‌دهند، که ناشی از به وجود آمدن و یا تحریک پلاسمون‌های سطحی در آن‌ها است. در این تحقیق، طیف بازتابش آرایه‌ای از نانوحفره‌های لایه نازک طلا و نقره بر روی بستر ITO در محیط هوا با ضریب شکست 1 با استفاده کردن از روش تفاضل محدود در حوزه‌ی زمان با انتخاب مش‌بندی مناسب در نرم‌افزار لومریکال شبیه سازی کرده‌ایم. با استفاده از نتایج شبیه‌سازی نانوحفره‌های میله‌ای و لوله‌ای شکل در لایه نازک با جنس‌های مختلف، طلا و نقره با ارتفاع 100 نانومتر بررسی شده است. واژه های کلیدی: حساسیت، نانوآرایه، پلاسمونیک، تشدید پلاسمون سطحی، حسگری.

واژه های کلیدی: *حساسیت، نانوآرایه، پلاسمونیک، تشدید پلاسمون سطحی، حسگری.*

Investigation of alternating arrays of gold and silver with specific structures

Raeesi, Shayeste[1]; Sahebsara, Peyman;

[1] *Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan*

[2] *Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan*

Abstract

One of the most attractive properties of metal nanoparticles is its optical properties, which depend on the size, shape and material of the nanoparticles as well as the environment around them. When metals enter nano regime, they exhibit various complex optical properties, which are due to the formation of surface plasmons. In this research, we have simulated the reflection spectra of an array of gold and silver thin film nanopores on the ITO substrate in air with a refractive index of 1 using the time-difference difference method by selecting the appropriate lattice in Lumerical software. Using the simulation results of rod- and tubular- shaped nanopores in a thin layer with different materials, gold and silver with a height of 100 nm have been investigated

Keywords: *Sensivity, Nanoarray, Plasmonic, Surface Plasmon Resonance, Sensing.*

PACS No. *68, 78*

مقدمه

پلاسمون سطحی به نوسانات منسجم الکترون‌های لایه‌ی رسانا در سطوح فلزات گفته می شود که بااستفاده از تابش الکترو مغناطیس در سطح میان فلز و دی‌الکتریک به وجود می‌آید [1].

از آنجایی که پلاسمون‌های سطحی به تغییرات ضریب شکست سطح فلز حساس هستند، از این پدیده می‌توان به عنوان ابزاری برای حسگری نوری استفاده کرد. در مجموع، دو نوع پلاسمون سطحی برای تولید حسگرهای مبتنی بر پلاسمون مورد استفاده قرار می‌گیرد: 1-تشدید پلاسمون سطحی پخش شده، 2-تشدید پلاسمون سطحی منطقه‌ای[2][3].

در این پژوهش، شبه ذره‌های پلاسمون‌ها و نحوه‌ی تحریک آن‌ها در نانوذرات، در چارچوب نظریه‌ی مای بررسی می‌گردد. علاوه بر آن میزان اثرگذاری متغیر شکل و همینطور جنس نانوذره‌های

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

فلزی بر روی پسامد تشدید پلاسمون سطحی جایگزیده به طور تحلیلی و عددی مورد بررسی قرار گرفته است.

با استفاده از لایه نازک فلزی در حسگرهای پلاسمونیکی تشدید پلاسمون رخ می دهد که می‌توان حساسیت لایه فلزی را با تغییر دادن جنس، شکل، اندازه و... افزایش داد. به منظور بهبود حسگرهای پلاسمونی به جای استفاده از نانوذرات منفرد از آرایه‌های متناوب استفاده شده است. زیرا در صورت آرایه‌ای بودن ساختار، میدان الکترومغناطیسی قوی‌تری به وجود می‌آید و نسبت به ساختارهای دیگر، سطح حسگری بزرگتری داریم[4].

در این پژوهش تفاوت آرایه‌ای متناوب از نانوحفره‌های لوله‌ای شکل و همچنین آرایه‌ای متناوب از نانولوله‌های فلزی از جنس طلا و نقره نشان داده شده است.

برای داشتن حسگری با حساسیت بالا باید به دنبال جذب بالایی باشیم. با استفاده از نرم‌افزار لومریکال و ماژول FDTD نمودارهای بازتابش بر حسب طول موج را برای ساختارهای پیشنهادی‌مان به دست آورده‌ایم. روش تفاضل محدود در حوزه‌ی زمان FDTD روشی برای شبیه‌سازی مسائل الکترومغناطیسی است و در محاسبه کردن تمام برهمکنش‌های الکترومغناطیسی مانند پراکندگی، جذب، انتشار و انعکاس به کارگرفته می‌شود. این روش، نتایج را در حوزه‌ی زمان به دست می‌دهد و با به‌کارگیری تبدیل فوریه، می‌توان آن را به دامنه‌ی بسامد انتقال داد.

این روش باعث می‌شود برای مدل‌سازی یک شکل و قالب جدید ضرورتی به فرمول‌سازی‌های پیچیده توابع گرین نباشد و صرفاً ساختارمان را مش‌بندی می‌کنیم[5].

در این نمودارها به دنبال دره‌هایی هستیم که FWHM(یعنی اندازه‌ی پهنا در نصف عمق دره) بزرگتری داشته باشند. ضریب شایستگی حسگر از رابطه ی زیر به دست می‌آید[6]:

$$FOM = \Delta S / FWHM \quad (1)$$

که در این رابطه ΔS به معنای حساسیت نیز از رابطه‌ی :

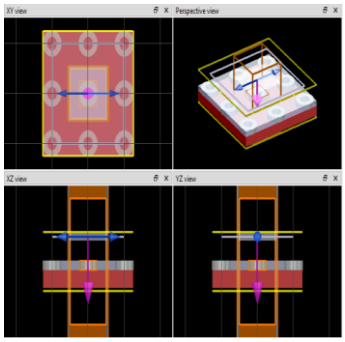
$$\Delta S = \Delta\lambda / \Delta n \quad (2)$$

به دست می آید، که $\Delta\lambda$ مربوط به طول موج و Δn مربوط به ضریب شکست می‌باشد [7].

Commented [WU1]:
Commented [WU2R1]:

شبیه سازی:

در نقطه‌ی شروع با استفاده از نرم افزار لومریکال و ماژول FDTD، همان طور که در تصویر 1 نمایش داده شده است ساختاری از جاذب پلاسمونی را که به صورت بستری از جنس ITO و روی آن لایه نازکی به ارتفاع 100 نانومتر است را طراحی کرده ایم بر روی لایه‌ی نازک طلا حفره هایی را به شکل نانولوله‌هایی با ارتفاع 100 نانو متر، شعاع درونی 52 نانومتر، شعاع بیرونی 105 نانو متر، فاصله‌ی مرکز تا مرکز نان لوله ها 400 نانومتر و فاصله‌ی دیوار به دیوار آنها 200 نانومتر قرار داده‌ایم و ساختارمان را در محیط هوا با ضریب شکست 1 بررسی و مطالعه کرده‌ایم و تاثیر جنس را در این ساختار نشان داده‌ایم. در این تحقیق از طلا و نقره به عنوان لایه نازک و نانو لوله‌ها استفاده شده است که این فلزات مطابق با داده‌های جانسون و کریستی که در کتابخانه‌ی نرم افزار لومریکال موجود است و طیف بازتابش و عملکرد حسگری در ناحیه‌ی مرئی بررسی شده است. با قرار دادن منبعی به شکل موج تخت طفحه‌ای در راستای z در بالای این ساختار و درنظر گرفتن مش‌بندی مناسب و قرار دادن مانیتور بازتابش در بالای ساختار در حالت دو بعدی (2D z normal) نمودارهای بازتابش بر حسب طول موج را به دست آورده‌ایم.



شکل 1: نمایش سه بعدی ساختار طراحی شده‌ی این جاذب پلاسمونی در نرم افزار لومریکال، ماژول FDTD

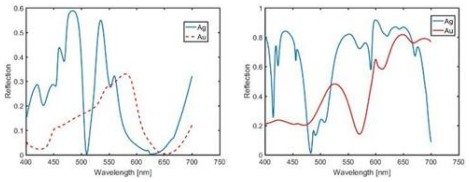
آنالیت در حسگر

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

روی نانوفیلم و نانو لوله‌ها قرار می‌گیرد. جهت تحریک ساختار طراحی شده، یک موج فرودی صفحه‌ای در راستای محور z را روی اعمال می‌کنیم. همانگونه که قبلاً گفته شد، تغییراتی که در محیط انجام می‌شود، موجب تغییر در ثابت انتشار پلاسمون‌های سطحی شده‌است و از ویژگی‌های نوری هر ساختار باید برای پلاسمون‌های سطحی استفاده کرد. میزان بازتاب نور توسط ساختار از معادله ی زیر محاسبه می‌شود[7].

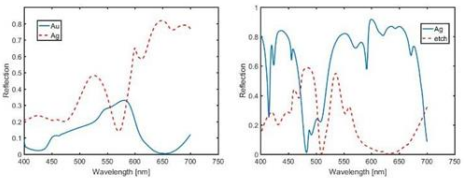
(3)

$$R = A - T + 1$$



مقایسه‌ی نمودار بازتابش برحسب طول موج آرایه‌ای متناوب از طلا و نقره. نمودار سمت راست نشان دهنده‌ی لایه‌ی نازک فلزات طلا و نقره که نانوحفره‌های لوله‌ای شکل از داخل آن خارج گردیده‌است. نمودار سمت چپ مربوط به ساختاری که فیلمی روی آن در نظر گرفته نشده‌است و صرفاً نانولوله‌هایی از فلزات با جنس‌های طلا و نقره تعبیه شده‌است.

در شکل 2، نمودار سمت راست مربوط به ساختاری است که لایه‌ی نازک طلا روی ITO گذاشته شده‌است و در آن نانولوله‌هایی را به صورت حفره خارج کرده‌ایم. خط آبی رنگ مربوط به فلز نقره و خط قرمز مربوط به فلز طلا می‌باشد. نمودار مربوط به طلا FWHM (به معنای اندازه ی پهنا در نیمه‌ی ارتفاع می‌باشد) بیشتر است و برای حسگری مناسب‌تر است. نمودار سمت چپ مربوط به ساختاری است که نانولوله‌ها روی بستر ITO قرارگرفته‌اند و با تغییر دادن جنس نانو لوله‌ها، آن‌ها را برای استفاده به عنوان حسگر مورد مطالعه قرار داده ایم. دو فلز طلا و نقره را بررسی کردیم، FWHM دره‌های فلز طلا که طیف بازتاب آن با خط قرمز رنگ نشان داده شده نسبت به فلز نقره که نمودار آن با خط آبی نمایش داده شده بیشتر است.



مقایسه‌ی نمودار بازتابش برحسب طول موج آرایه‌ای متناوب از طلا و نقره. نمودار سمت راست مربوط به مقایسه‌ی ساختار نانوحفره‌های لوله‌ای شکل نقره (آبی) و نانولوله‌های نقره (قرمز) روی بستر ITO است. نمودار سمت چپ، مقایسه‌ی ساختار نانولوله‌های از جنس طلا (آبی) و نانوحفره‌های لوله‌ای طلا (قرمز) روی بستر ITO را نشان می دهد.

جنس لایه‌ی نازک ساختاری که در شکل 1 نشان داده شده است، یکبار طلا در نظرگرفته شده است که نانولوله‌ها را از آن به صورت حفره بیرون آورده و بار دیگر بدون در نظر گرفتن لایه نازک نانولوله‌ها از جنس طلا در نظر گرفته شده است. در شکل 3 سمت چپ طیف بازتابش ساختار را نشان می‌دهد. طبق نمودار، خط قرمز رنگ مربوط به فیلم طلا و نانوحفره‌های میله‌ای شکل، در طول موج حدود 540 نانومتر جذب حدود 30 درصد حاصل شده‌است. مطابق با معادله‌ی (1) دره‌ها در نمودار بازتابش نمایانگر قله‌ها در نمودار جذب هستند. در سمت راست شکل 3، جنس لایه نازک طلا را به نقره تغییر داده‌ایم و با حالتی که فیلمی وجود نداشته باشد و صرفاً نانولوله‌هایی از جنس نقره روی بستر ITO قرار گرفته است مقایسه کرده‌ایم. نشان داده شده استکه خط آبی رنگ مربوط به حالت اول و خط قرمز مربوط به حالت مذکور دوم است. در نمودار آبی رنگ دره‌های زیادی را مشاهده می‌کنیم که تیزتر هستند و عمق بیشتری را نسبت به خط قرمز رنگ دارند ولی در حالت دوم که نانولوله‌ها نقره را روی بستر ITO چیده‌ایم، در طول موج 630 نانو متر دره‌ی پهنی را مشاهده کردیم که برای حسگری مناسب‌تر بوده‌است.

نتایج

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

در این مقاله به بررسی آرایه‌های متناوب، نانوحفره و نانوله‌هایی از جنس طلا و نقره پرداختیم. نمودارهای 2و 3 برای ساختار طراحی شده که روی آن لایه‌ای فلزی با ارتفاع مشخص قرار گرفته و روی آن حفره‌های لوله‌ای شکل به صورت منظم ایجاد شده‌است و در حالت دیگر، نانولوله‌هایی از جنس طلا و نقره به صورت منظم روی بستر ITO نشانده شده‌است. نتایج نشان می‌دهد که در حالت اول که لایه نازک فلز نشانده شداست. نتایج نشان می‌دهد که در حالت اول که لایه نازک فلز نشانده شده‌است، ساختار از جنس طلا نسبت به نقره FWHM بیشتری دارد. هنگامیکه نانولوله‌ها به صورت منظم روی روی بستر ITO هستند، در حالتی کهساختاز از جنس طلا است، FWHM بیشتر است.

با مقایسه‌های حالت‌های متفاوت لایه نازک و نانولوله‌های قرار گرفته روی بستر ITO برای دوفلز طلا و نقره نشان داده شد که برای فلز طلا درحالت لایه نازک و نانو حفره‌ها در طول 540 نانو متر، جذب 30 درصدص حاصل شده‌است و در حالتی که نانولوله‌های نقره ای روی بستر به صورت منظم چیده شده‌است در طول موج 630 نانومتر، دره‌ی پهنی را مشاهده کردیم که برای حسگری مناسب‌تر است.

مراجع

[1] Zayats, Anatoly V., Igor I. Smolyaninov, and Alexei A. Maradudin. "Nano-optics of surface plasmon polaritons." Physics reports 408, no. 3-4 (2005): 131-314

[2] Maier, Stefan Alexander. Plasmonics: fundamentals and applications. Springer Science & Business Media, (2007).

[3] Willets, Katherine A., and Richard P. Van Duyne. "Localized surface plasmon resonance spectroscopy and sensing." Annu. Rev. Phys. Chem. 58 (2007): 267-297.

[4] Stefan A. Mailer, Centre for Photonics and Photonic Materials Department of Physics, University of Bath, UK, "Plasmonic fundamental and application", Springer, (2007).

[5] Sullivan, Dennis M. Electromagnetic simulation using the FDTD method. John Wiley & Sons, (2013).

[6] Yi-Tao Long, Chao Jing, "Localized surface plasmon resonance based nanobiosensores", Springer, (2014).

[7] Elrashidi, Ali. "Ultra-Sensitive Gas Sensor Using Different Plasmonic Nanoparticles." Journal of Computational and Theoretical Nanoscience 13, no. 1 (2016): 280-285.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی اصول اولیه پایداری ساختاری، خواص الکترونی و توپولوژی آلیاژهای نیم‌هویسلر SrAuAs و BaAuAs : با تقریب‌های پتانسیل GGA و GGA+mBJ

صفوی ، مریم ؛ دعوت‌الحق ، سعید

بخش فیزیک، پردیس علوم، دانشگاه شیراز ، شیراز ۷۱۹۴۶

چکیده

به دلیل اهمیت و خواص منحصر به فرد مواد توپولوژی، در این مقاله پایداری ساختاری و خواص توپولوژی آلیاژهای نیم هویسلر SrAuAs و BaAuAs را مورد بررسی قرار داده‌ایم. هر دو ترکیب دارای پایداری شیمیایی در برابر واپاشی به عناصر سازنده و پایداری مکانیکی هستند. قبل از اعمال اثر جفت‌شدگی اسپین-مدار، در ساختار نواری این ترکیبات وارونگی نواری و گاف صفر دیده می‌شود، اعمال اثر جفت‌شدگی اسپین-مدار سبب ایجاد گاف نواری می‌شود در حالی‌که همچنان وارونگی نوار نیز حفظ می‌شود. اعداد کوانتومی توپولوژی محاسبه شده برای این ترکیبات (۱; ۰ ۰ ۰) به دست می‌آید که نشان‌دهنده‌ی عایق توپولوژی قوی هستند.

واژه های کلیدی: *عایق‌های توپولوژی، ترکیبات نیم‌هویسلر.*

First principles investigation of structural stability, electronic and topological properties of SrAuAs and BaAuAs half-Heusler alloys: with potential approximations of GGA and GGA+mBJ

Safavi, Maryam ; Davatolhagh, Saeid

Department of Physics, school of science, Shiraz University, Shiraz 71946

Abstract

Due to the importance and unique properties of topological materials, in this paper we investigated the structural stability and topological properties of SrAuAs and BaAuAs half-Heusler alloys. Both compounds have chemical stability against decay to constituent elements and mechanical stability. Before applying the spin-orbit coupling effect, band inversion and zero gap are seen in the band structure of these compounds, applying the spin-orbit coupling effect causes a band gap that also maintains the band inversion. The calculated topological quantum numbers of these compounds are found to be (1; 0 0 0) which indicate they are strong topological insulators.

***Keywords**: topological insulators, half-Heusler compounds.*

PACS No. (11 Times New Roman, italic)

مقدمه

مجموعه‌ای از تحولات نظری که از سال ۲۰۰۵ میلادی شروع شد، نشان داد که عایق‌های غیرمغناطیسی می‌توانند در دسته‌هایی از مواد توپولوژی طبقه‌بندی شوند، که این دسته‌ها توجه تحقیقاتی زیادی را به خود جلب کردند [۱]. این مواد در دو بعد با یک ثابت توپولوژی Z_2 مشخص می‌شوند که دو مقدار صفر (عدد زوج) یا یک (عدد فرد) می‌تواند داشته باشد. مقدار صفر نشان دهنده یک عایق غیرمغناطیسی با توپولوژی بدیهی است اما مقدار یک بیانگر عایق توپولوژی غیربدیهی است [۲]. در سه بعد، خاصیت

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

توپولوژی این مواد با یک مجموعه ثابت توپولوژی (ν_0 ;ν_1 ν_2 ν_3) مشخص می‌شود که اگر ν_0 مساوی یک باشد به آن عایق توپولوژی قوی گفته می‌شود، اگر ν_0 مساوی صفر باشد ولی یکی از ν_iها مخالف صفر باشند در آن صورت به آن عایق توپولوژی ضعیف می‌گویند و در صورتی که تمام νها برابر با صفر باشند آن ماده یک عایق معمولی با توپولوژی بدیهی می‌باشد [۳]. مواد توپولوژی به دلیل ساختار نواری ویژه‌ای که دارند دارای خواص منحصر به فردی هستند. در واقع، عایق‌های توپولوژی همانند عایق‌های معمولی دارای یک گاف در ساختار نواری حجمی می‌باشند ولی آن‌ها همچنین دارای حالت‌های فلزی روی لبه (مواد دو بعدی) یا سطح (مواد سه بعدی) می‌باشند [٤]. در این مواد، الکترون‌های سطحی یا لبه‌ای شبه فوتون می‌باشند به عبارتی یک رابطه خطی بین انرژی و تکانه وجود دارد که نشان دهنده‌ی تحرک‌پذیری بالای الکترون‌ها و در نتیجه رسانندگی الکترونی بالا می‌باشد. علاوه بر این، در مواد توپولوژی توان اتلافی بسیار کم می‌باشد زیرا الکترون‌ها به هنگام مواجه با ناخالصی آن را دور می‌زنند و در مسیر اصلی خود، حرکت را ادامه می‌دهند. حالت‌های کوانتومی در این مواد بسیار پایدار است و تحت تاثیر اختلالات جزئی قرار نمی‌گیرند [۵]. به همین دلیل این مواد دارای کاربردهای فراوانی در وسایل مغناطیسی، الکترونیکی، سلول‌های خورشیدی و...است [٦و٧]. به همین دلیل در سال‌های اخیر، خواص توپولوژی ترکیبات متنوعی با ساختار کریستالی متفاوت به صورت آزمایشگاهی و نظری مورد بررسی قرار گرفت که از میان آن‌ها می‌توان به ساختارهای نیم‌هویسلر [۸]، بلند-روی [۹] و شبکه لانه زنبوری [۱۰] اشاره کرد.

بنابراین در ادامه به بررسی خواص پایداری، الکترونی و توپولوژی ترکیبات نیم‌هویسلر SrAuAs و BaAuAs پرداخته‌ایم.

روش محاسبات

محاسبات تعیین فاز، خواص الکترونی و پایداری ساختار با حل معادلات کوهن-شم بر اساس اصول اولیه با استفاده از نظریه تابعی چگالی با تقریب پتانسیل متفاوت GGA و GGA+mBJ در کد محاسباتی WIEN2k انجام شده است. در این کد محاسباتی، خواص فیزیکی بر اساس روش FP-LAPW (تمام پتانسیل-امواج تخت بهبود یافته خطی) محاسبه می‌شود. در این مقاله R_{MT} $\times K_{max}=8$، $L_{max}=10$ و $G_{max}=14$ $a.u^{-1}$ انتخاب شده است. ثابت شبکه بهینه با برازش معادله حالت مورناگان با منحنی حجم-انرژی محاسبه شده است. برای محاسبه خواص توپولوژی از کد محاسباتی Wannier90 و WannierTools استفاده شده است که به کمک این نرم‌افزار ساختار نواری تنگ‌بست حاصل از توابع وانیر موضعی به دست آمده و با ساختار نواری حاصل از نظریه تابعی چگالی مطابقت داده شده، و در نهایت با بررسی مراکز بار وانیر، ثابت توپولوژی این ترکیبات که فاقد تقارن وارونگی فضایی هستند، محاسبه می‌شود.

بحث و نتایج

ترکیبات نیم‌هویسلر دارای یک ساختار مکعبی مرکز سطحی با پایه سه اتمی می‌باشد که هر سه اتم در راستای قطر اصلی با فاصله (۰,۲۵، ۰,۲۵، ۰,۲۵) از هم قرار گرفته‌اند. بنابراین این ساختار می‌تواند سه پیکربندی متفاوت داشته باشد. بر اساس ترکیباتی که ما گزارش کرده‌ایم اگر عناصر d^0 (Ba ،Sr) وسط قرار بگیرد فاز α، اگر آنیون (As) وسط قرار بگیرد فاز β و اگر عنصر واسطه (Au) وسط قرار بگیرد فاز γ نامیده می‌شود. همان‌طور که شکل ۱، نمودار برازش معادله حالت مورناگان و منحنی حجم-انرژی، نشان می‌دهد برای هر دو ترکیب فازβ پایدارتر است. همچنین به کمک این نمودار ثابت شبکه بهینه مشخص می‌شود که مقادیر در جدول ۱ ارائه شده است. جهت بررسی پایداری شیمیایی ترکیبات، انرژی تشکیل بر اساس رابطه زیر محاسبه شده است:

$$\Delta E_f = E_{XYZ} - (E_X + E_Y + E_Z) \quad (۱)$$

که E_{XYZ} و E_iها به ترتیب مقدار انرژی کل فاز پایدارتر بر واحد فرمول و مقدار انرژی بر واحد اتم مربوط به اجزای سازنده در ساختار تعادلی می‌باشد. انرژی تشکیل ترکیبات مورد نظر، محاسبه شده و در جدول یک گزارش شده است که منفی بودن این مقادیر نشان دهنده‌ی پایداری شیمیایی این ترکیبات در برابر واپاشی به عناصر سازنده می‌باشد. برای بررسی پایداری مکانیکی ترکیبات، به محاسبه ثابت‌های الاستیکی پرداخته شده است و نتایج در جدول ۱ ارائه شده است. کریستال‌های مکعبی دارای یک مدول حجمی B و دو مدول برشی (G, G´) هستند که به کمک روابط زیر بر اساس ثابت‌های الاستیکی قابل محاسبه هستند،

$$B = (C_{11} + 2C_{12})/3 > 0 \ , \quad (۲)$$

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$G'=(C_{11}-C_{12})/2 >0$, (۳)
$G=C_{44} >0$. (۴)

همان‌طور که قابل مشاهده است ثابت‌های به دست آمده در معادلات بالا صدق می‌کنند و این نشان‌دهنده‌ی پایداری مکانیکی این ترکیبات می‌باشد.

در ادامه، ساختار نواری ترکیب SrAuAs در پتانسیل GGA و GGA+mBJ ارائه شده است، که تفاوتی در مقدار گاف نواری دیده نمی‌شود و برای هر دو ترکیب به ازای هر دو پتانسیل مقدار گاف نواری صفر می‌باشد (شکل ۲). مقدار مغناطش برای هر دوترکیب صفر به دست آمده است که این مقدار تاییدی بر مقدار انتظاری به کمک قانون اسلایتر پائولینگ می‌باشد، زیرا این ترکیبات دارای ۱۸ الکترون ظرفیت می‌باشند. برای بررسی دقیق‌تر به عنوان مثال ساختار نواری جزئی، ترکیب SrAuAs را ارائه کرده‌ایم (شکل ۳)، که نتایج برای هر دو ترکیب مشابه هستند. در ساختار نواری در نقطه Γ یک وارونگی نواری بین نوار s و p نسبت به عایق‌های معمولی دیده می‌شود. که این می‌تواند نشان دهنده‌ی یک توپولوژی غیربدیهی در سیستم باشد. بنابراین در مرحله بعد اثر جفت‌شدگی اسپین–مدار بر روی ترکیبات مورد نظر بررسی شده است که به عنوان مثال ساختار نواری SrAuAs با حضور جفت-شدگی اسپین مدار در شکل ٤ ارائه شده است. همان‌طور که قابل ملاحظه است، هم‌چنان وارونگی نواری حفظ شده و علاوه بر این یک گاف نواری برای هر دو ترکیب به وجود آمده است که مقدار آن در جدول ۲ گزارش شده است. همچنین مقدار وارونگی نواری که از اختلاف انرژی بین نوار s و p محاسبه می‌شود در جدول ۲ ارائه شده است که این مقدار به سادگی با اختلالات جزئی از بین نمی‌رود. با توجه به نتایج به دست آمده، یعنی وجود گاف و وارونگی نواری می‌توان انتظار داشت که این دو ترکیب عایق توپولوژی باشند. بنابراین در ادامه به محاسبه ثابت توپولوژی پرداختیم، و برای هر دو ترکیب مجموعه مقادیر (۰ ۰ ۰؛۱) به دست آمد که این نشان‌دهنده‌ی یک عایق توپولوژی قوی است. در شکل ۵ حالت‌های سطحی محاسبه شده برای ترکیب SrAuAs گزارش شده است که وجود حالت‌های سطحی در سطح فرمی و این‌که در فاصله x تا گاما فقط در یک نقطه حالت‌های سطحی یک خط انرژی ثابت رو قطع می‌کنند، می‌تواند به طور مجدد تاییدی بر توپولوژی غیربدیهی سیستم و ثابت‌های به دست آمده باشد.

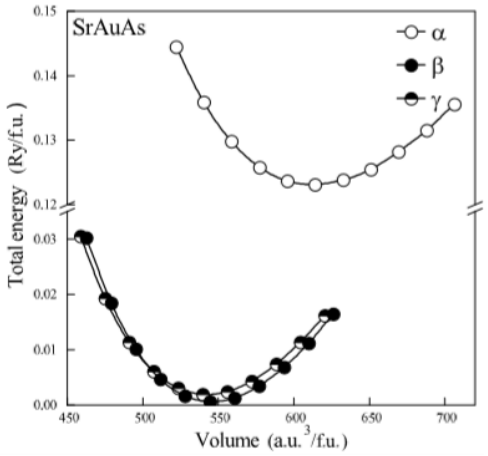
جدول‌ها و شکل‌ها

جدول ۱ : ثابت شبکه بهینه a بر حسب آنگستروم، انرژی تشکیل ΔE_f بر حسب الکترون ولت بر اتم ، ثابت‌های الاستیکی C_{ij} بر حسب گیگا پاسکال.

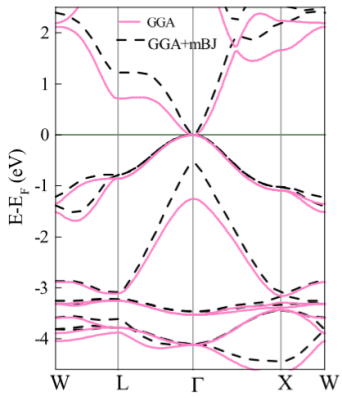
ترکیب	a	ΔE_f	C_{11}	C_{12}	C_{44}
SrAuAs	٦,٨٥	-٠,٦٧	١٣٤,٢٥	٥,٤٧	١٦,٤٠
BaAuAs	٧,١٤	-٠,٥٩	٩٤,١٤	١٥,٦٥	٤١,٧٧

جدول۲ : مقدار گاف نواری E_g و مقدار وارونگی نواری E_{BIS} (در واحد الکترون ولت) در حضور جفت‌شدگی اسپین–مدار می‌باشد.

ترکیب	E_g	E_{BIS}
SrAuAs	٠,٠٧١	-٠,٦٨٩
BaAuAs	٠,٠٥٩	-٠,٦٢٠

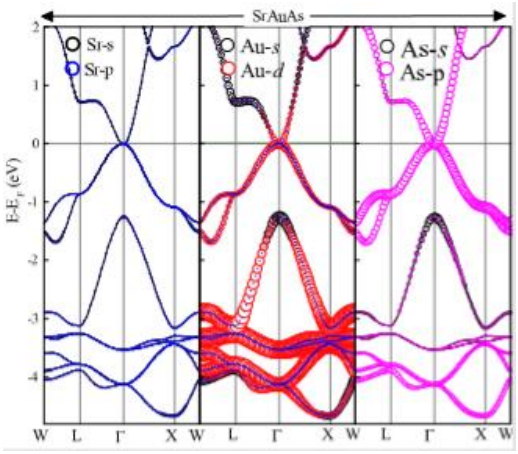


شکل ۱: منحنی انرژی–حجم برای سه پیکربندی متفاوت ترکیب نیم‌هویسلر SrAuAs.

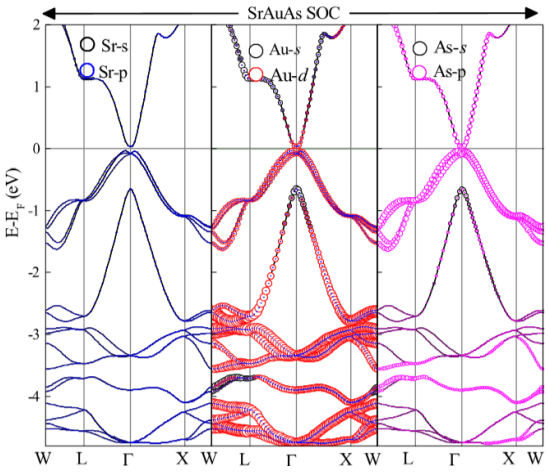


شکل ۲: ساختار نواری ترکیب نیم‌هویسلر SrAuAs با پتانسیل‌های متفاوت GGA و GGA+mBJ.

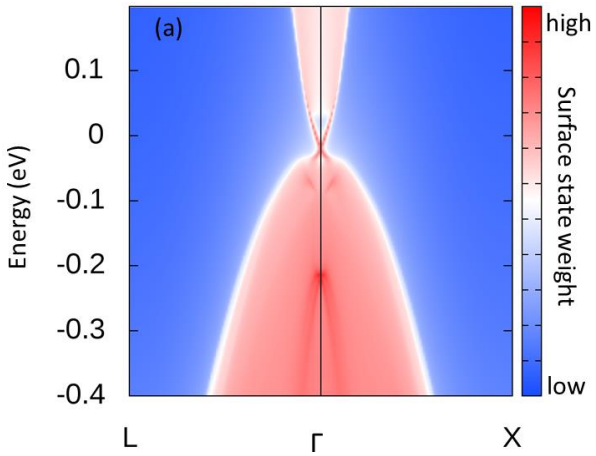
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل ۳: ساختار نواری جزئی، بدون اعمال جفت‌شدگی اسپین–مدار برای SrAuAs.



شکل ٤: ساختار نواری جزئی، همراه با اعمال جفت‌شدگی اسپین–مدار برای SrAuAs.



شکل ٥: طیف حالت‌های سطحی ترکیب نیم‌هویسلر SrAuAs برای سطح (۱ ۰ ۰).

نتیجه گیری

نتایج محاسبات انرژی تشکیل و ثابت‌های الاستیکی نشان می‌دهد که ترکیبات SrAuAs و BaAuAs دارای پایداری شیمیایی در برابر واپاشی به عناصر تشکیل دهنده و پایداری مکانیکی هستند. مقدار مغناطش محاسبه شده برای هر دو ترکیب صفر می‌باشد. ساختار نواری این ترکیبات قبل از اعمال اثر جفت‌شدگی اسپین–مدار، یک وارونگی نواری بین نوارهای s و p در نقطه گاما نشان می‌دهند و گاف نواری محاسبه شده با تقریب پتانسیل GGA و GGA+mBJ مقدار صفر را نشان می‌دهد که با اعمال اثر جفت‌شدگی اسپین–مدار همچنان وارونگی نواری حفظ می‌شود ولی در سطح فرمی یک گاف ایجاد می‌شود. حالت‌های سطحی محاسبه شده و ثابت‌های توپولوژی (۰ ۰ ؛۱) حاکی بر این می‌باشند که این ترکیبات عایق توپولوژی قوی هستند.

مرجع‌ها

[۱] A. Soluyanov and D. Vanderbilt; "computing topological invariants without inversion symmetry" Physical Review B 83, No. 23 (2011): 235401.

[۲] Y. Ma, L. Kou, Y. Dai and T. Heine; "Proposed two-dimensional topological insulator in SiTe" *Physical Review B* **94**, No. 20 (2016): 201104.

[۳] M. Konig, S. Wiedmann, C. Brune, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X. L. Qi and S. C. Zhang; " Quantum spin Hall insulator state in HgTe quantum wells" *Science* **318**, No. 5851 (2007): 766-770.

[٤] A. Bansil, H. Lin and T. Das; "Colloquium: Topological band theory." *Reviews of Modern Physics* **88**, No. 2 (2016): 021004.

[٥] Z. Li and B. Wei; "Topological materials and topologically engineered materials: properties, synthesis, and applications for energy conversion and storage" *Journal of Materials Chemistry* **9**, No. 3 (2021): 1297-1313.

[٦] N. H. D. Khang, Y. Ueda and P. N. Hai; "A conductive topological insulator with large spin Hall effect for ultralow power spin-orbit torque switching" *Nature materials* **17,** No. 9 (2018): 808-813.

[٧] Z. Li and B. Wei; "topological materials and topologically engineered materials: properties, synthesis, and applications for energy conversion and storage" *Journal of Materials Chemistry A* **9**, No. 3 (2021): 1297–1313.

[٨] X. Zhang, Z. Hou, Y. Wang, G. Xu, C. Shi, E. Liu, X. Xi, W. Wang, G. Wu and X. Zhang; "NMR evidence for the topologically nontrivial nature in a family of half-Heusler compounds" *Scientific reports* **6**, No. 1 (2016): 1–7.

[٩] M. Orlita, D. Basko, M. Zholudev, F. Teppe, W. Knap, V. Gavrilenko, N. Mikhailov, S. Dvoretskii, P. Neugebauer, C. Faugeras, A. Barra, G. Martinez and M. Potemski; "Observation of three-dimensional massless Kane fermions in a zinc-blende crystal" *Nature Physics* **10**, No. 3 (2014): 233–238.

[۱۰] J. He, S. Ma, P. Lyu and P. Nachtigall; "unusual Dirac half-metallicity with intrinsic ferromagnetism in vanadium trihalide monolayers" *Journal of Materials Chemistry C* **4**, No. 13 (2016): 2518–2526.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تأثیر بلورینگی دیواره ها بر نحوه توزیع مایعات یونی رقیق محدودشده درون نانوحفره دی اکسید تیتانیوم

محمدپور ، فاطمه[۱] ؛ امیری، فاطمه[۱]

[۱]بخش فیزیک، دانشگاه فرهنگیان، تهران

چکیده

در کار حاضر، محلول رقیقی از مایع یونی بیمتیل ایمیدازولیوم کلراید ([C4mim][Cl]) درون شکاف نانوحفره ای محدود شد. دیواره های نانوحفره از جنس دی اکسید تیتانیوم و در فاز آمورف و بلوری آناتاس انتخاب شدند. مشاهده شد که در حالت آمورف، یک پتانسیل الکتروستاتیک در مجاورت دیواره ها القا شده بطوری که آنیون ها و کاتیون ها در مایع یونی به سمت الکترودهای مخالف حرکت کرده و در کنار آنها جمع شدند. در مقابل، نشان دادیم که درمورد مایع یونی محدود شده بین دیواره های دی کسید تیانیوم بلوری در فاز آناتاس، برهمکنش های الکتروستاتیک بین یون ها درون مایع یونی غالب است.

واژه های کلیدی: *نانوحفره دی اکسید تیتانیوم، آمورف، آناتاس.*

The effect of wall crystallization on the distribution of confined dilute ionic liquids within titanium dioxide nanopores

Mohammadpour, Fatemeh[1]; Amiri, Fatemeh[1]

[1] Department of Physics, Farhangian University, Tehran

Abstract

In the present work, a dilute solution of the ionic liquid of bimethyl imidazolium chloride ([C4mim] [Cl]) was confined within the nanopore slit. Nanopore walls were selected from titanium dioxide in the amorphous and crystalline phase of anatase. It was observed that in the amorphous state, an electrostatic potential was induced in the vicinity of the walls so that the anions and cations in the ionic liquid moved towards the opposite electrodes and accumulated next to them. In contrast, we showed that in the case of ionic liquid confined between the walls of crystalline titanium dioxide in the anatase phase, electrostatic interactions between ions within the ionic liquid predominate.

***Keywords**: titanium dioxide nanopore, amorphous, anatase*

PACS No. 60, 68.

مقدمه

مایعات یونی (Ionic Liquids) محدود شده در نانوحفره ها به دلیل کاربردهای متنوع در ساخت باطری ها، سلول های سوختی، سلول های خورشیدی رنگدانه ای و خازن های الکتروشیمیایی دو لایه ای (EDLCs) [۱]، اخیرا بسیار مورد توجه قرار گرفته اند. ویژگی های برجسته مایعات یونی مانند فشار بخار کم، پایداری حرارتی و شیمیایی بالا، اشتعال پذیری کم، پنجره الکتروشیمیایی گسترده، عملکرد بالا و سمیت کم، این مواد را کاندیدهای خوبی بعنوان الکترولیت در این دستگاه های الکتروشیمیایی می کند [۲]. نقطه مشترک در این دستگاه ها تماس مایعات یونی با الکترود فلزی یا اکسید فلزی است. در واقع، تمام فرآیندهای شیمیایی ضروری در مرز مشترک الکترولیت و الکترود

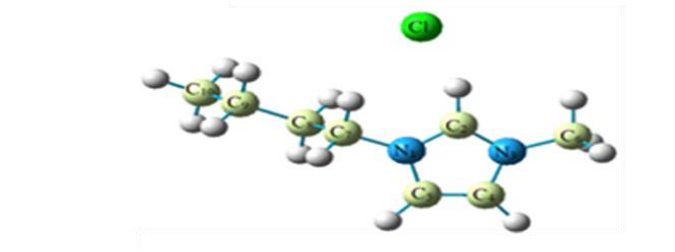
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

رخ می دهد. بنابراین، پاسخ کلی سلول، نتیجه مستقیم مهندسی دقیق چنین مرز مشترکی است. تحقیقات زیادی در مورد مایعات یونی محصور شده در داخل کانال های نانومقیاس ساخته شده با مواد و هندسه های مختلف انجام شده است. به عنوان مثال، گروه هونگ برخی از مطالعات را در مورد ساختار و دینامیک مایعات یونی در داخل نانوحفره‌های گرافیتی گزارش کرده اند [۳].

اکثر مطالعات انجام شده بر روی مایعات یونی خالص محصور شده درون نانوحفره ها متمرکز شده است. در حالی که رفتار مایعات یونی رقیق شده درون نانوحفره به علت شیلد شدن برهمکنش های الکتروستاتیکی با هیدراسیون یون ها [٤]، می‌تواند به شدت با مایعات یونی خالص محدود شده درون نانوحفره ها متفاوت باشد. در کار حاضر، ما شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی مایع یونی بیمتیل ایمیدازولیوم کلراید ([C4mim][Cl]) رقیق محصور شده در کانال‌های نانومقیاس را انجام داده‌ایم که طبق دانش ما، تا به امروز مورد بررسی قرار نگرفته‌اند. همچنین در این کار از نیمه هادی آمورف TiO_2 و همچنین بلوری TiO_2 در فاز آناتاس، به عنوان دیواره حفره (الکترودهای جامد) استفاده کرده و اثر بلورینگی دیواره بر توزیع مایع یونی رقیق را بررسی کردیم.

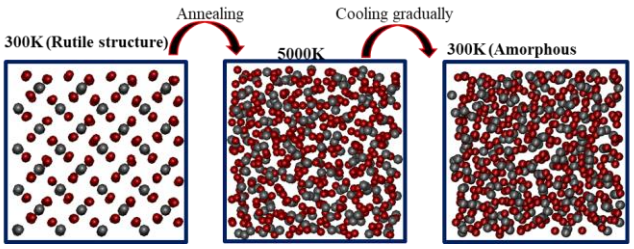
روش محاسباتی

شبیه سازی دینامیک مولکولی با استفاده ازپکیج GROMACS انجام شده است. در شبیه سازی های ما، از ترموستات تغییر مقیاس سرعت بهبود یافته که توسط گروه بوسی [۵] پیشنهاد شده است برای تنظیم دما در 300^0 K با ثابت جفت ۰,۱ ps استفاده شده است. در همه شبیه سازی ها از روش مش–ذرات اوالد (PME) برای برقرار کردن برهمکنش های دوربرد کولمبی با ثابت قطع ۱ nm و فاصله شبکه ۰,۱ nm استفاده شده است. پارامترهای بکار رفته برای مدلسازی برهمکنش های درون مولکولی و بین مولکولی اتم های اکسیژن و تیتانیوم در دیواره حفره آمورف و همچنین دیواره حفره بلوری با فاز آناتاس، کره های لنارد–جونز با ثابت های زیر می باشند: $\sigma_O = 0.303$ nm، $\varepsilon_O = 0.12$ kcal mol^{-1} ، $\sigma_{Ti} = 0.392$ nm، $\varepsilon_{Ti} = 0.041$ kcal mol^{-1} بارهای اتمی اکسیژن و تیتانیوم بترتیب ۱,۰۹۸e- و ۲,۱۹٦e+ انتخاب شدند [٦]. دیواره های TiO_2 در طول شبیه سازی فریز شدند. داده های OPLS-AA اصلاح شده برای شبیه سازی [C4mim][Cl] استفاده شد [۷]. ساختار [C4mim][Cl] که با استفاده از تئوری تابعی چگالی(DFT) در سطح نظریه B3LYP/6-311+G(d) با استفاده از برنامه Gaussian 09 بهینه شد در شکل ۱ دیده می شود. برای مولکول های آب از مدل SPC استفاده شد.



شکل ۱ : ساختار مولکولی بهینه شده مایع یونی [C4mim][Cl].

برای ساخت ساختار آمورف TiO_2، مشابه حالت تجربی، با استفاده از شبیه سازی MD، یک ساختار کریستالی اولیه تولید کرده، سپس آن را ذوب کرده و دوباره سرد کردیم [۸]. بدین ترتیب که یک دیواره کریستالی در فاز روتایل را با تکرار سلول واحد آن در سه بعد ساختیم. سپس تحت شرایط آنسامبل NVT، دیواره کریستالی را تا دمای ۵۰۰۰^0 K گرم کردیم. پس از رسیدن به این دما، سیستم تحت آنسامبل NPT به تعادل رسیده و سپس تحت یک تابع نمایی تا دمای ۳۰۰^0 K مجددا سرد شد. همانطور که در شکل ۲ دیده می شود، دیواره بلوری به این روش به یک ساختار آمورف تبدیل شد.



شکل ۲ : مراحل تبدیل دیواره بلوری TiO_2 به حالت آمورف.

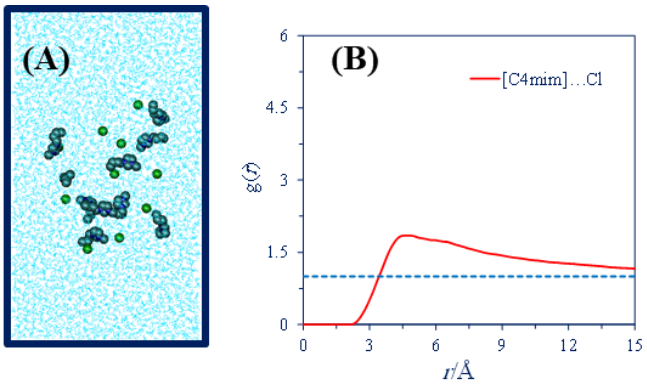
برای ساخت نانوحفره، دو دیوار TiO_2 آمورف ساخته شده و در فاصله ۱۰ nm از یکدیگر قرار داده شدند. همچنین نانوحفره با دیواره بلوری TiO_2 در فاز آناتاس هم در همان ابعاد ساخته شد. الکترولیت، محلول رقیق مایع یونی [C4mim][Cl]، قبل از وارد شدن درون

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

نانوحفره به مدت ns ۱۰ در آنسامبل NPT به تعادل رسیده شد. شرایط مرزی دوره ای در تمام جهات در نظر گرفته شد. همه شبیه سازی ها با اعمال شرایط اولیه متفاوت، ۳ بار تکرار شده است.

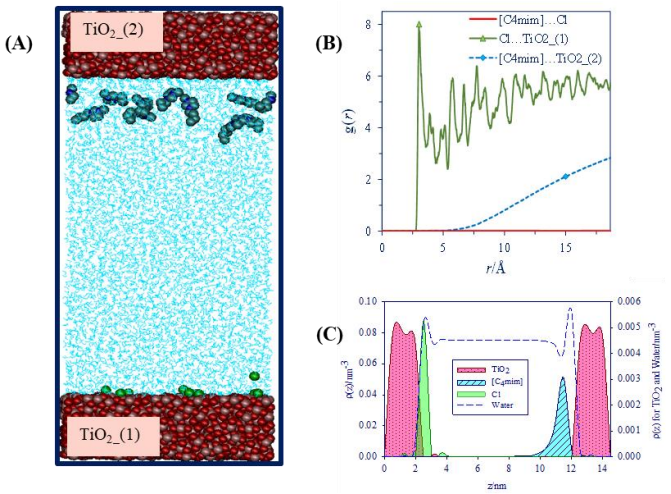
نتایج و بحث

در ابتدا شبیه سازی مولکولی در حالت بالک به مدت ns ۳۰ برای مایع یونی رقیق شامل ۱۰ جفت یون ([C4mim][Cl]) درون ۶۸۱۱ مولکول آب انجام شد. پیک نمودار تابع توزیع شعاعی بین مرکز جرم آنیون-کاتیون در فاصله حدود ۴,۵Å رخ داده که بیانگر وجود جفت های یونی در محلول رقیق آبی است، شکل ۳B. اسنپ شات مربوطه در شکل ۳A نمایش داده شده است.



شکل ۳ : (A) اسنپ شات محلول رقیق مایع یونی شامل ۱۰ جفت یون [C4mim][Cl] درون ۶۸۱۱ مولکول آب، (B) تابع توزیع شعاعی بین مرکز جرم آنیون و کاتیون در محلول رقیق آبی.

محلول رقیق ذکر شده در بالا، در بین دو دیواره آمورف TiO_2 به فاصله nm ۱۰ از یکدیگر، قرار داده شده و شبیه سازی دینامیک مولکولی در آنسامبل NVT به مدت ns ۲۰ در دمای K ۳۰۰ ادامه پیدا کرد. اسنپ شات از ساختار نهایی شبیه سازی شده در شکل ۴A نمایش داده شده است. در این شکل بوضوح دیده می شود که آنیون های کلر در کنار یکی از دیواره ها و کاتیون ها در کنار دیواره دیگر جمع شده اند. تابع توزیع شعاعی g(r) در شکل ۴B، برهمکنشی بسیار قوی بین یکی از دیواره های آمورف TiO_2 با اتم های آنیون کلر را نشان می دهد. آنیون ها درفاصله نزدیکی حدود ۲,۵ Å از این دیواره قرار گرفته اند. تابع توزیع شعاعی در این شکل نشان می دهد که برهمکنش بین مرکز جرم آنیون ها و کاتیون ها تقریبا به صفر رسیده و از حالت جفت یونی خارج شده اند. پروفایل چگالی در شکل۴C نشان می دهد که آنیون کلر و مولکول های آب در فاصله تقریبا یکسانی از یکی از دیواره های آمورف TiO_2 قرار گرفته اند در حالی که در مجاورت دیواره دیگر یک لایه آب جمع شده و پس از آن لایه کاتیونی شکل گرفته است.



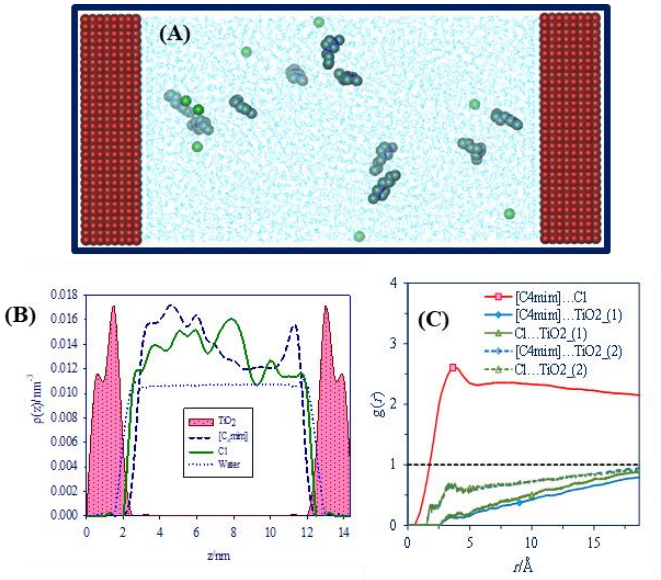
شکل ٤ : (A) اسنپ شات، (B) تابع توزیع شعاعی بین مرکز جرم آنیون و کاتیون و (C) پروفایل چگالی از محلول رقیق [C4mim][Cl] محدود شده درون نانوحفره آمورف TiO_2 در دمای K ۳۰۰.

همانطور که در بخش های قبلی مورد بحث قرار گرفت، یون ها درون الکترولیت های رقیق بصورت جفتی و با هم حرکت می کنند، شکل ۳، در حالی که وقتی در داخل دو دیواره TiO_2 آمورف محصور می شوند، به طور جداگانه حرکت کرده و از همدیگر جدا می شوند. بنابراین می توان نتیجه گرفت که دیواره های TiO_2 آمورف نقش اساسی در جداسازی یون ها دارند. برای درک بهتر اثرات ساختار دیوار (آمورف) بر ساختار و دینامیک مایعات یونی، ما یک محلول آبی رقیق شامل ۱۰ جفت [C4mim][Cl] را که بین دو دیواره بلوری TiO_2 در فاز آناتاس محصور شده اند تحت شرایط و روش مشابه به مدت ns ۵۰ شبیه‌سازی کردیم. اسنپ شات در شکل ۵A بوضوح نشان می دهد که جفت یون ها بطور همگن در فضای نانوحفره با دیواره های بلوری توزیع شده اند.

پرفایل چگالی در شکل ۵B یک رفتار لایه‌بندی نزدیک به سطوح TiO_2 آناتاس را نشان می‌دهد، بطوری که آنیون‌های کلرید اولین لایه و کاتیون‌های $[C_4mim]^+$ لایه دوم را در هر دو طرف

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

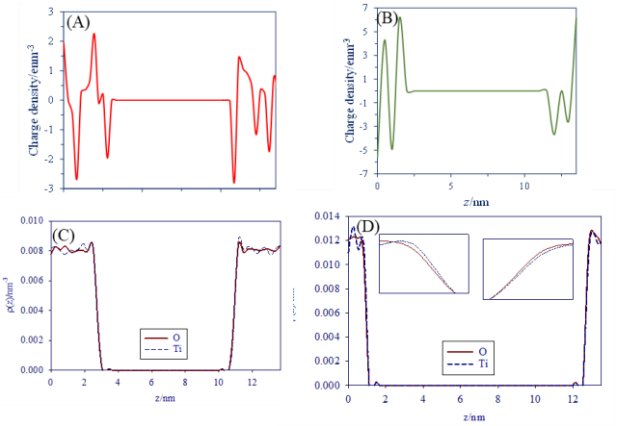
تشکیل می‌دهند. توجه داشته باشید که پروفایل های چگالی در این سیستم تقریباً متقارن هستند و یون ها درون نانوحفره با دیواره های بلوری به صورت همگن توزیع شده اند. جالب توجه است که هیچ جفت یون متمایزی مشاهده نشد. شکل ۵C نمودارهای g(r) را برای کاتیون–آنیون، دیواره های حفره–کاتیون و دیواره های حفره–آنیون در این سیستم نشان می دهد. واضح است که یون‌ها برهمکنش ضعیفی با دیواره‌های آناتاس TiO_2 دارند، در حالی که همبستگی آنیون–کاتیون قوی است و تأیید می‌کند که یون ها بصورت جفتی در حرکت هستند.



شکل ۵ : (A) اسنپ شات، (B) پروفایل چگالی و (C) تابع توزیع شعاعی بین مرکز جرم آنیون و کاتیون از محلول رقیق $[C_4mim][Cl]$ محدود شده درون نانوحفره بلوری TiO_2 در فاز آناتاس در دمای ۳۰۰ K.

نتیجه گیری

این یافته‌ها را می‌توان با این واقعیت توصیف کرد که به دلیل توزیع نامتقارن چگالی بار در دیواره‌های آمورف در مقایسه با دیواره بلوری آناتاس، یک میدان الکترواستاتیک در نزدیکی دیواره نانوحفره‌های TiO_2 آمورف القا می‌شود. این میدان می‌تواند منجر به جداسازی کامل جفت‌های یون IL در محلول‌های آبی رقیق محصور شده بین دیواره‌های آمورف TiO_2 شود. همانطور که در شکل ٦A نشان داده شده است، چگالی بار اولیه دو دیواره آمورف به طور قابل توجهی متفاوت است. میانگین بارهای اولیه روی لایه سطحی TiO_2_(1) و TiO_2_(2) بترتیب $-1.9e\ nm^{-3}$ و $2.7e\ nm^{-3}$ بود. با ادامه شبیه‌سازی، کاتیون‌های ایمیدازولیوم عمدتاً با TiO_2_(2) به دلیل این تفاوت بار برهم‌کنش داشته و آنیون ها به سمت سطح TiO_2_(1) حرکت می کنند. در نهایت، ترتیب مولکول های TiO_2 در لایه های سطحی و زیرسطحی به دلیل برهمکنش با الکترولیت ها تغییر می کند. پروفایل چگالی نشان داده شده در شکل ٦B توزیع نامتقارن چگالی بار در دیواره های آمورف را پس از ۵۰ ns شبیه سازی تایید می کند. در مقابل، برای سیستم های بلوری، توزیع بار هر دو دیواره یکسان و متقارن است. نظم دوربرد در ساختارهای کریستالی منجر به تغییر ناچیزی در ساختار به دلیل برهمکنش با الکترولیت می شود.



شکل ٦ : (A) چگالی بار اولیه، (B) چگای بار نهایی، (C) پروفایل چگالی اولیه و (D) پروفایل چگالی نهایی دیواره های آمورفTiO_2 پس از ۵۰ ns شبیه سازی.

مرجع‌ها

[۱] Q. Dou, L. Liu, B. Yang, J. Lang, X. Yan, *Nature communication* **8**, (2017) 2188.
[۲] I. Osada, H. de Vries, B. Scrosati, S. Passerini. *Angew. Chem. Int. Ed.* **55**, (2016) 500 – 513.
[۳] N. N. Rajput, J. Monk and F. R. Hung, *J. Phys. Chem. C* **116**, (2012) 14504–14513.
[٤] J. Comtet, A. Nigue`s, V. Kaiser, B. Coasne, L. Bocquet and A. Siria, *Nat. Mater* **16**, (2017) 634.
[٥] G. Bussi, T. Zykova-Timan and M. Parrinello, *J. Chem. Phys.* **130,** (2009) 074101.
[٦] R. Singh, N. N. Rajput, X. He, J. Monk and F. R. Hung, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15**, (2013) 16090–16103.
[٧] S. V. Sambasivarao and O. Acevedo, *J. Chem. Theory Comput.* **5** (2009) 1038–1050.
[٨] A. France-Lanord, E. Blandre, T. Albaret, S. Merabi, D. Lacroix and K. Termentzidis, *J. Phys.: Condens. Matter*, **26** (2014) 055011.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مطالعه فرکانس طبیعی یک سازه‌ی فرضی با استفاده از سنسور وایبرو ویژن

بکاولی ، هدیه[۱] ؛ باقری ، محمد[۲] ؛ وزیری ، امیرعلی[۲] ؛ کافیان ، حسین[۲] ؛ شریفی ، سهیل[۱]

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

[۲]شرکت ویراسنس ، مشهد، ۹۱۷۷۹۳۶۹۱۷، ایران

چکیده

پایش سلامت سازه یا فرآیند SHM ، از حیاتی‌ترین امور در دنیای امروزی است. در این فرآیند، سازه‌ها توسط سنسورهای مختلف بررسی می‌شوند و سلامت آن‌ها گزارش می‌شود. در این تحقیق فرکانس طبیعی سازه اولیه با استفاده از سنسور وایبرو ویژن مطالعه می‌گردد. این روش شامل اندازه‌گیری با استفاده از شیوه‌ی آزمایشگاهی ماره می‌باشد که یک مدل فرضی از یک پل بررسی شده و نتایج آن با سنسور شتاب‌سنج Rion مورد مقایسه قرار گرفته است. نتایج فرکانس طبیعی به دست آمده از سنسور وایبرو ویژن و سنسور Rion دارای اختلاف ۰.۰۰۹۸ هرتز است که نتیجه‌ی قابل قبولی می‌باشد.

واژه های کلیدی: *پایش سلامت سازه، روش ماره، وایبرو ویژن*

Study of the natural frequency of a hypothetical structure using a Vibro vision sensor

Bakavoli, Hedieh[1]; Bagheri, Mohammad[2]; Vaziri, Amir Ali[2] ; Kafian, Hossein[2]; Sharifi, Soheil[1]

[1] Department of Physics,Faculty of science, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad
[2]Veerasense Company, Mashhad, 9177936917, Iran

Abstract

Structural Health Monitoring or SHM process is one of the most vital things in the world today. In this process, structures are monitored by various sensors and their health is reported. In this research, the natural frequency of the primary structure is studied using a vibration sensor. This method involves measuring using Mara's laboratory method, in which a hypothetical model of a bridge is investigated and the results are compared with a Rion accelerometer sensor. The natural frequency results obtained from the Vibro Vision sensor and the Rion sensor have a difference of 0.0098 Hz, which is an acceptable result.
***Keywords**: SHM, Moire method, Vibro Vision*

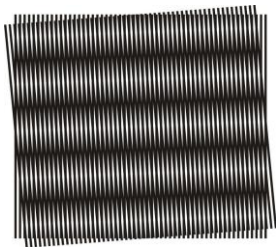
PACS No. 742

مقدمه

نظارت بر روند استحلاک پل‌ها، یکی از مسائل مهم در علوم کاربردی می‌باشد [۱].

تکنیک ماره یک پدیده‌ی فیزیکی و مبتنی بر بینایی است و طرح ماره، از روی هم افتادن دو توری ایجاد می‌شود. (شکل۱). در پژوهش‌های گذشته، از طرح ماره برای اندازه‌گیری شتاب و فرکانس طبیعی پل استفاده شده است [۱]. با استفاده از طرح ماره بر روی پل، جابه‌جایی‌های کوچک پل در مقیاس بزرگ‌تر نمایان می‌شوند که به عنوان یکی از ویژگی‌های این شیوه می‌باشد. این روش یک ابزار قدرتمند است که می‌تواند با به دست آوردن جابه‌جایی پل، به فرکانس‌های طبیعی آن برسد [۱،۲].

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل۱: روی‌هم‌نهی دو توری یک بعدی و ایجاد طرح ماره

مبانی نظری

با داشتن توابع عبور دو توری، گام طرح ماره به دست می‌آید.

$$T_1 = \frac{1}{2} + \cos(k_1 \cdot r + \varphi_1) \quad (1)$$

$$T_2 = \frac{1}{2} + \cos(k_2 \cdot r + \varphi_2) \quad (2)$$

در روابط (1) و (2)، $k = \frac{2\pi}{q}$، T، q، x و φ به ترتیب بردار عمود بر توری، ضریب عبور، گام توری، مکان و فاز اولیه هستند. برای به دست آوردن تابع عبور طرح ماره، روابط (1) و (2) در یکدیگر ضرب می‌شوند.

$$T_m = T_1 T_2 = \frac{1}{4} + \frac{1}{2}\cos(k_1.r + \varphi_1) + \frac{1}{2}\cos(k_2.r + \varphi_2) + \frac{1}{2}\cos[(k_1 + k_2).r + (\varphi_1 + \varphi_2)] + \frac{1}{2}\cos[(k_1 - k_2).r + (\varphi_1 - \varphi_2)] \quad (3)$$

جملات چهارم و پنجم نشان‌دهنده ضریب عبور طرح ماره هستند. در صورتی که زاویه بین دو بردار k_1 و k_2 کمتر (بیشتر) از $\frac{\pi}{2}$ باشد، جمله‌ی چهارم (پنجم) تاثیر بیشتری را می‌گذارد که از آن‌ها به عنوان طرح ماره یاد می‌شود.

درنهایت به کمک روابط بردار k، گام طرح ماره به دست می‌آید.

$$q_m = \frac{q_1 q_2}{\sqrt{q_1^2 + q_2^2 - 2q_1 q_2 \cos\theta}} \quad (4)$$

نتایج به دست آمده حاصل از توری متناوب در یک راستا است [2]. برای به دست آوردن جابه‌جایی در دو راستا، باید از طرحی متناوب در دو راستا استفاده کرد. به همین جهت در این پژوهش از یک طرح مشبک متناوب در راستای عمودی و افقی استفاده شده است که طرح ماره را ایجاد کنند (شکل۲).

برای رسیدن به جابه‌جایی سازه، باید رابطه‌ی بین جابه‌جایی یک پیکسل دوربین با جابه‌جایی در اندازه‌های واقعی محاسبه شود. در این سیستم، بزرگنمایی به صورت رابطه‌ی (5) به دست می‌آید:

$$M = \frac{u}{y} \quad (5)$$

که در این رابطه، M بزرگنمایی، u طول تصویر ایجاد شده بر روی سنسور دوربین و y طول جسم است. طول تصویر از ضرب تعداد پیکسل‌های طولی تشکیل دهنده‌ی تصویر در اندازه یک پیکسل به دست می‌آید:

$$u = N \times a \quad (6)$$

در رابطه‌ی (6)، N تعداد پیکسل‌های طولی تصویر و a اندازه یک پیکسل است. اکنون جابه‌جایی طرح ماره بر روی پل محاسبه می‌شود:

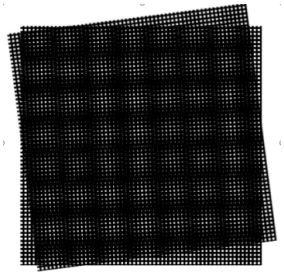
$$x_m = w \times a \times \frac{1}{M} \quad (7)$$

در رابطه‌ی (7)، x_m جابه‌جایی طرح ماره بر روی پل و w مقدار جابه‌جایی طرح ماره برحسب پیکسل را نشان می‌دهند. برای به دست آوردن جابه‌جایی پل باید جابه‌جایی طرح توری چسبیده شده بر روی پل اندازه‌گیری شود. برای این منظور، با استفاده از رابطه (7) و (8) جابه‌جایی پل به دست می‌آید.

$$x_g = \left(\frac{q}{q_m}\right) \times x_m \quad (8)$$

در رابطه‌ی (8)، x_g جابه‌جایی طرح اصلی، q گام توری و q_m گام طرح ماره است. همچنین گام طرح ماره با توجه به رابطه‌ی (9) حاصل می‌شود:

$$q_m = r \times a \times \frac{1}{M} \quad (9)$$



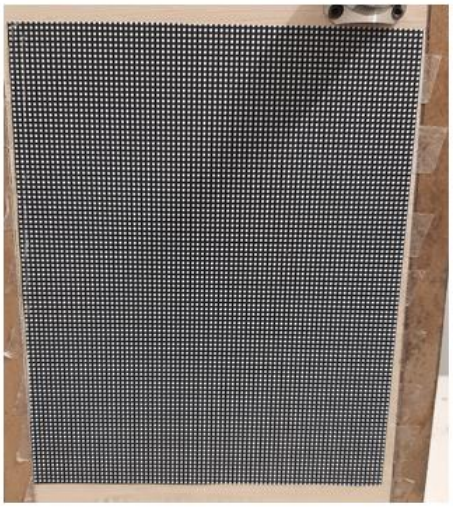
شکل۲: روی‌هم‌نهی دو طرح مشبک و ایجاد طرح ماره

به این ترتیب گام طرح ماره و جابه‌جایی پل به دست می‌آید [۳].

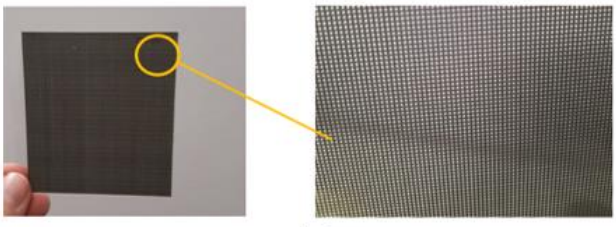
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مبانی تجربی

برای بررسی دقت سنسور وایبرو ویژن، از یک سازه‌ی اولیه استفاده شد. این سازه، یک مکعب ۵ وجهی ساخته شده با چوب MDF است که ابعاد تقریبی آن ۲۰ ×۳۵ × ۳۵ سانتی متر می‌باشد. برای ایجاد طرح ماره، از دو توری با فاصله‌ی تقریبی ۲۰۰ سانتی متر از یکدیگر استفاده شد که هر توری در دو راستای افقی و عمودی، دارای گام است. توری اول با گام تقریبی ۲ میلی‌متر، بر روی کاغذ چاپ شده و بر روی سازه اولیه چسبانده شده است. توری دوم برای غلبه بر اثرات گرمایی منبع نور، بر روی شیشه‌ای به ابعاد ۷.۴ ×۷.۲ سانتی متر چاپ شده است (شکل۳).



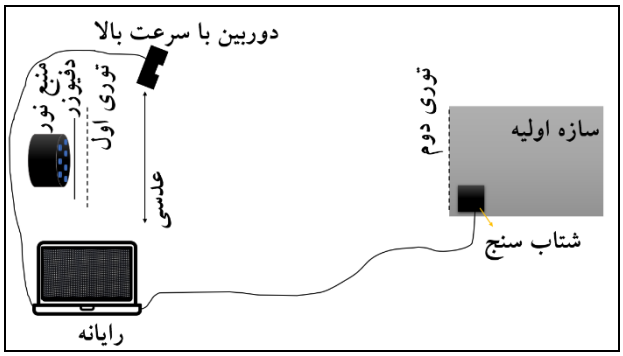
(الف)



(ب)

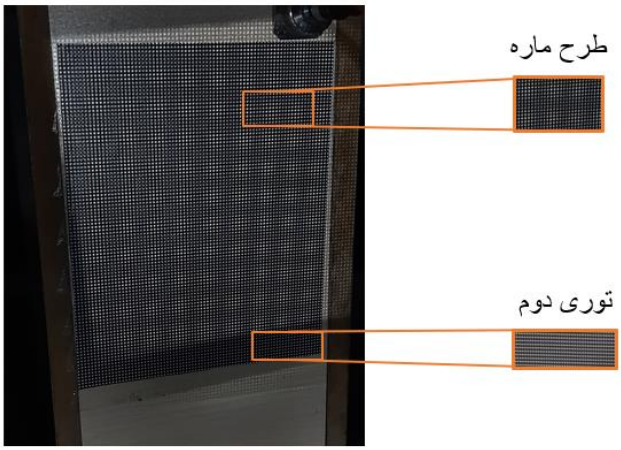
شکل۳: توری‌های استفاده شده در سنسور وایبرو ویژن. الف) توری اول و متصل به سازه اولیه ب) توری دوم چاپ شده بر روی شیشه.

برای ایجاد طرح ماره از یک سیستم نوری استفاده شده است. این سیستم از چراغ‌های LED مدل COB، نور سفید و با توان ۵۰ وات استفاده گردیده و در مقابل نور سفید یک دفیوزر برای داشتن نور یکنواخت به کار رفته است. در مقابل دفیوزر، توری دوم قرار دارد و تصویر این توری بر روی توری اول به کمک یک عدسی با فاصله کانونی ۳۰ سانتی متر تحریر می‌شود. برای صحت سنجی نتایج، از یک سنسور شتاب سنج Rion مدل AKG394، استفاده شد. در شکل ۴، چیدمان مورد استفاده نشان داده شده است.



شکل۴: طرحواره کلی چیدمان مورد استفاده

با روی هم افتادن دو توری، طرح ماره تشکیل می‌شود (شکل۵).



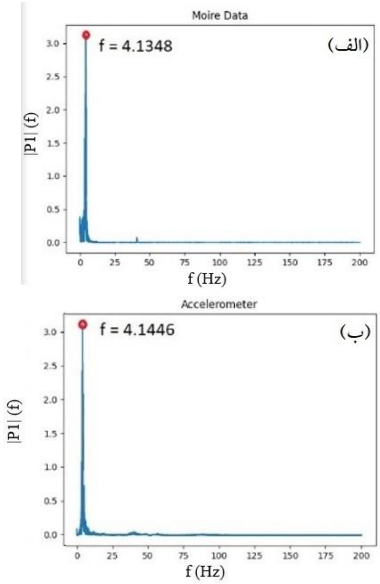
شکل۵: طرح ماره ایجاد شده بر روی سازه اولیه

پس از قرار دادن سازه‌ی اولیه بر روی میز لرزان و ایجاد طرح ماره مناسب، به کمک دوربین با سرعت بالا، مدل Contrastech Leo 720s، از طرح ماره تصویربرداری شده است. دوربین و

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

شتاب سنج Rion، به کمک کابل‌های مخصوص به رایانه متصل شده و داده‌ها به رایانه منتقل می‌شوند. تصاویر ثبت شده به کمک دوربین با سرعت بالا، توسط نرم افزار پایتون پردازش و نتایج حاصل از سنسور شتاب سنج Rion با سنسور وایبرو ویژن مقایسه می‌شوند. در محاسبه فرکانس طبیعی به روش ماره، مرکز هر لکه اندازه‌گیری می‌شود. سپس این مراکز به صورت عمودی و افقی به یکدیگر متصل شده و تشکیل خط‌های افقی و عمودی می‌دهند. از جابه‌جایی این خطوط دو بار مشتق گرفته شده و با استفاده از تبدیل فوریه سریع (FFT)، داده‌های شتاب به فضای فرکانس منتقل می‌شوند. همچنین داده‌های به دست آمده از شتاب‌سنج Rion، به کمک نرم افزار پردازنده آن، در یک فایل اکسل ذخیره می‌شوند و با استفاده از تبدیل فوریه سریع به فضای فرکانس انتقال می‌یابند.

شکل ۶، مقایسه نمودارهای فرکانسی حاصل از داده‌های دو سنسور وایبرو ویژن و شتاب‌سنج Rion را نشان می‌دهد که به کمک نرم افزار پایتون به دست آمده‌اند. فرکانس طبیعی مرتبه اول سازه، دارای اختلاف ۰.۰۰۹۸ هرتز است که نشان دهنده دقت سنسور وایبرو ویژن می‌باشد.



شکل۶: فرکانس‌های طبیعی به دست آمده سازه اولیه الف) به کمک سنسور وایبرو ویژن ب) به کمک شتاب سنج Rion

نتیجه گیری

در پژوهش انجام شده، فرکانس‌های طبیعی سازه‌ی اولیه با استفاده از سنسور وایبرو ویژن و شتاب سنج Rion مورد بررسی قرار گرفت. بر روی سازه‌های واقعی، خصوصا پل‌ها، با به دست آوردن و بررسی کردن فرکانس طبیعی آن‌ها طی زمان، می‌توان در مورد سلامت سازه تصمیم گیری کرد.

تقدیر و تشکر

با تشکر فراوان از شرکت ویراسنس که در انجام این پژوهش، ما را با تهیه تجهیزاتی از جمله دوربین پر سرعت، سنسور شتاب سنج Rion و ..... یاری کردند.

همچنین با تشکر فراوان از دانشگاه فردوسی مشهد کد ۵۷۴۰۵.

مرجع‌ها

[1] S. Ri, Q. Wang, H. Tsuda, H. Shirasaki, and K. Kuribayashi, “Displacement measurement of concrete bridges by the sampling Moiré method based on phase analysis of repeated pattern,” *Strain*, vol. 56, no. 6, pp. 1–20, 2020, doi: 10.1111/str.12351.

[2] V. Saveljev, S.-K. Kim, and J. Kim, “Moiré effect in displays: a tutorial,” *Opt. Eng.*, vol. 57, no. 03, p. 1, 2018, doi: 10.1117/1.oe.57.3.030803.

[3] S. Rasouli, “Use of a moiré deflectometer on a telescope for atmospheric turbulence measurements,” *Opt. Lett.*, vol. 35, no. 9, p. 1470, 2010, doi: 10.1364/ol.35.001470.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی تقویت کننده‌های فیبری نقطه کوانتومی در مقایسه با آلاینده‌های فلزات خاکی نادر

ایلچی قزاانی، مریم[۱]

[۱]پژوهشکده فوتونیک و فناوری‌های کوانتومی، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی، صندوق پستی: ۱۴۱۵۵-۱۳۳۹، تهران

چکیده

در این مقاله، عملکرد یک تقویت کننده فیبری نقطه کوانتومی (QDFA) PbSe با تقویت کننده فیبرنوری آلاییده به ایتربیوم (YDFA) مورد بررسی و مقایسه قرار گرفته است. نتایج تجربی نشان می دهند که QDFA می‌تواند در توان دمش ۱۵ W و طول فیبر ۱ m به بهره ۱۴ dB برسد، در حالی‌که بهره YDFA در شرایط مشابه تنها ۷ dB است. از اینرو، آلاینده‌های PbSe QD از بهره و توان خروجی بالاتری در طول‌های کوتاه‌تر نسبت به تقویت کننده‌های متداول با آلاییدگی فلزات خاکی نادر بهره‌مند هستند که از بزرگ بودن سطح مقطع جذب آنها ناشی می‌شود.

واژه‌های کلیدی: *نقطه کوانتومی، تقویت کننده فیبری نقطه کوانتومی، اپتیک غیرخطی، ارتباطات نوری، نانو مواد.*

Investigation of quantum dot fiber amplifiers versus rare earth dopants

Ilchi-Ghazaani, Maryam[1]

[1] *Photonics and Quantum Technology Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute (NSTRI), AEOI, P.O.Box: 1339-14155, Tehran*

Abstract

In this paper, the performance of a PbSe quantum dot fiber amplifier (QDFA) with yttrium-doped fiber amplifier (YDFA) is investigated. Experimental results show that QDFA can reach 14 dB at a pump power of 15 W and fiber length of 1 m, while the YDFA gain increases only 7 dB under similar conditions . Therefore, PbSe QD dopants benefit higher gain and output power at shorter fiber lengths than conventional amplifiers with rare-earth dopants due to their larger adsorption cross section.

***Keywords**: Quantum dot, quantum dot fiber amplifier, nonlinear optics, optical communication, nanomaterials.*

PACS No.: 42, 81

مقدمه

تقویت کننده‌های فیبری، ابزارهای بسیار مهمی در سیستم‌های مخابرات نوری و ارتباطات نوری هستند. با توجه به محدودیت پهنای بلند و بهره تقویت‌کننده‌های فیبری معمولی (مانند YDFA[۱] ها) که از ماهیت یون‌های خاکی نادر ناشی می‌شود، تقویت کننده‌های فیبری مبتنی بر نقاط کوانتومی (QDFA[۲]) نیمه‌رسانا با عملکرد بهتر در دو دهه گذشته روی کار آمدند.

در این تقویت کننده‌ها، نقاط کوانتومی (QDs[۳]) نیمه‌رسانا مانند PbSe، PbS، CdS و PbTe به عنوان عناصر نوری غیرخطی با ابعاد نانومتر در هسته فیبر آلاییده می‌شوند و محیط بهره لیزر را تشکیل می‌دهند [۱، ۲].

نقاط کوانتومی دارای پهنای باند گسیل بزرگ (۱۵۰ nm)، سطح مقطع جذب بزرگ و نیز ویژگی‌های کوک‌پذیری طول موج گسیلی (۸۵۰-۱۸۰۰ nm) هستند [۳]. به طور خاص، PbSe QD ها را

[1] Ytterbium-doped fiber amplifier
[2] Quantum-dot fiber amplifier
[3] Quantum dots

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

می‌توان برای جذب و گسیل به ترتیب در محدوده طیفی ۸۰۰– nm ۱۸۰۰ و ۱۸۰۰–۴۰۰ nm تنظیم کرد [۴].

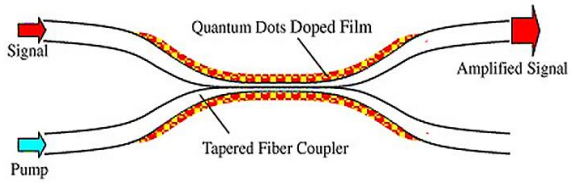
امروزه، QD های نیمه‌هادی به دلیل اثرات منحصر به فرد محصورسازی کوانتومی سه بعدی جفت‌های الکترون–حفره و عملکرد نوری مناسب، توجه زیادی را به خود جلب کرده‌اند و به طور گسترده در تقویت کننده‌های فیبری، سلول‌های خورشیدی، لیزرهای سوئیچ Q و قفل شده مدی استفاده می‌شوند. با تغییر سایز نانوکریستال‌های QD می‌توان قله طیف گسیل آنها را تنظیم کرد و لیزرها و تقویت کننده‌های کوک‌پذیر تولید کرد.

در این مطالعه، به کمک مدل‌های نظری، به مقایسه عملکرد تقویت کننده‌های فیبری آلاییده به PbSe و Yb می‌پردازیم و توان دمش و طول فیبر را برای شناسایی قوی‌ترین فلورسانس تغییر می‌دهیم. با استفاده از مشخصات منبع دمش و سیگنال ورودی به تقئیت کننده، پارامترهای بهره و توان اشباع بدست می‌آیند.

تئوری

شـــکل ۱، طرحواره یک تقویت‌کننده فیبری با آلاییدگی QD را نشان می‌دهد. چیدمان مشتمل بر اجزای زیر است:

- ماده میزبان: شیشه‌های سدیم– آلومینیوم– بوروسیلیکات
- ماده آلاینده: نقاط کوانتومی PbSe در خط ۱۶۳۰ nm
- منبع تحریک: لیزر دایود در ۱۵۵۰ nm
- مولتی پلکسر تقسیم طول موج (WDM) و ایزولاور (ISO)



شکل ۱ : شمای تقویت‌کننده فیبری PbSe QD

برای توصیف فرآیندهای گذار الکترون و ترازهای انرژی، از یک مدل دو ترازی استفاده می‌شود که در شکل ۲ نمایش داده شده است. گاف انرژی میان ترازها به دمای سیستم بستگی دارد. نرخ جذب و گسیل دمش با W_{pa} و W_{pe} و نرخ جذب و گسیل سیگنال با W_{sa} و W_{se} نشان داده شده است. همچنین، N_1 و N_2 به ترتیب چگالی جمعیت ترازهای ۱ و ۲ را نشان می‌دهند.

با توجه به شکل ۲، تغییرات جمعیت ترازها در سیستم ۲–ترازه QD به‌صورت زیر است [۵]:

$$\frac{dN_1}{dt} = -\left(W_{12pa} + W_{12sa} + W_{12ASE_a}\right)N_1 + A_{21}N_2 + \left(W_{21pe} + W_{21se}\right)N_2 \quad (۱)$$

$$\frac{dN_2}{dt} = \left(W_{12pa} + W_{12sa} + W_{12ASE\_a}\right)N_1 - A_{21}N_2 - \left(W_{21pe} + W_{21se}\right)N_2 \quad (۲)$$

$$N = N_1 + N_2 \quad (۳)$$

به‌علاوه، معادلات آهنگ QDFA در حالت‌پایا به‌صورت زیر است:

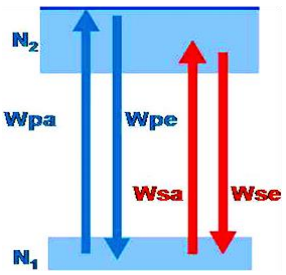
$$\frac{dP_p}{dz} = -\Gamma_p\left(\sigma_{pa}N_1 - \sigma_{pe}N_2\right)P_p - \alpha_p P_p \quad (۴)$$

$$\frac{dP_s}{dz} = \Gamma_s\left(\sigma_{se}N_2 - \sigma_{sa}N_1\right)P_s - \alpha_s P_s \quad (۵)$$

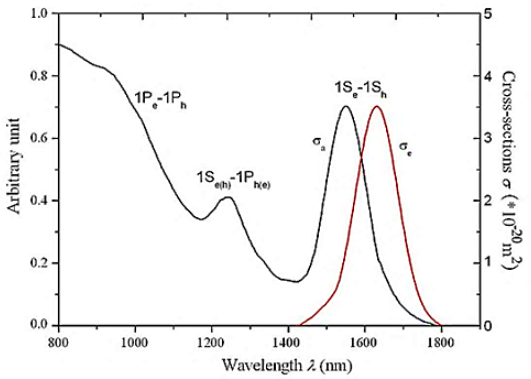
که Γ_s و Γ_p به ترتیب نشان دهنده ضریب همپوشانی سیگنال و دمش هستند و α_s و α_p به ترتیب تلفات زمینه سیگنال و باریکه دمش را نشان می‌دهند. از اینرو، بهره کلی سیستم برابر است با:

$$G = \Gamma_s\left(\sigma_{se}N_2 - \sigma_{sa}N_1\right) \quad (۶)$$

همچنین، σ_{12sa} و σ_{12se} به ترتیب سطح مقطع‌های جذب و گسیل سیگنال و و σ_{12pa} و σ_{12pe} سطح مقطع‌های جذب و گسیل دمش هستند و از نمودار شکل (۳) به دست می‌آیند.



شکل۲ : طرحواره سیستم ۲ ترازی شیشه‌های آلاییده به QD [۵]



شکل۳ : سطح مقطع‌های جذب و گسیل PbSe QD [۴]

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

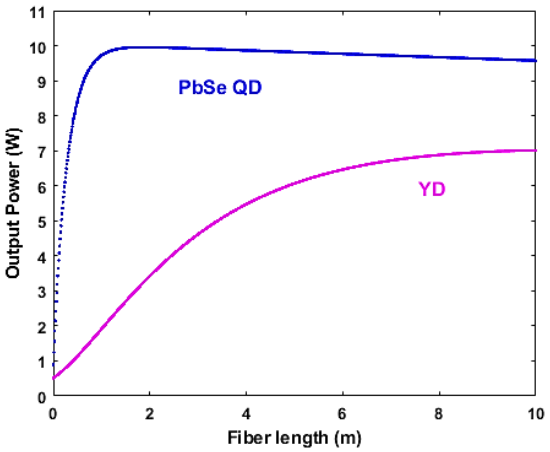
بحث و نتیجه‌گیری

برای دست‌یابی به بهترین عملکرد سیستم‌های کاربردی، لازم است ویژگی‌های تقویت‌کننده‌ها با استفاده از مدل‌سازی نظری و شبیه‌سازی بهینه شوند. در اینجا، از روش رانگ کوتای مرتبه ۴ برای حل معادلات دیفرانسیل خطی مرتبه اول، (۵)-(۱)، استفاده‌شده است. مقادیر عددی پارامترهای مورد استفاده در شبیه سازی از مرجع [۶] استخراج شده است.

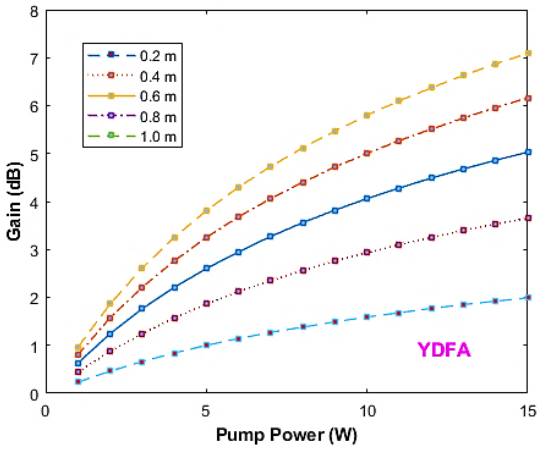
شکل ۴، مقایسه توان خروجی تقویت کننده‌های QDFA و YDFA را به عنوان تابعی از طول فیبر نشان می‌دهد. مطابق شکل، QDFA به سرعت و در ۱ m اول فیبر به حالت اشباع می‌رسد و بیشینه توان خروجی آن ۱۰ W است. در حالی‌که YDFA بعد از طی ۱۰ m از فیبر محیط فعال، هنوز به اشباع نرسیده است. به عبارت دیگر، تقویت‌کننده QD سیگنال ورودی را بیشتر از تقویت‌کننده Yb تقویت می‌کند. این اختلاف، از بزرگ‌تر بودن سطح مقطع جذب آلاینده‌های PbSe نسب به Yb ناشی می‌شود. افزایش بیشتر طول در QDFA، کاهش یکنواخت توان خروجی را به دنبال دارد که به دلیل افزایش تلفات و میرایی در تقویت کننده است. در این شبیه سازی، سایز نانوذرات QD برابر ۵٫۵ nm درنظر گرفته شده است.

تغییرات بهره تقویت‌کننده (dB) برحسب توان دمش در فیبرهایی به طول ۰٫۲ m، ۰٫۴ m، ۰٫۶ m، ۰٫۸ m و ۱ m آلاییده‌های Yb و QD به ترتیب در شکل‌های ۵ و ۶ آمده است. مقدار توان اولیه سیگنال ورودی در هر دو حالت برای میزبان‌های مختلف مقدار ثابت ۰٫۵ W در نظر گرفته‌شده است.

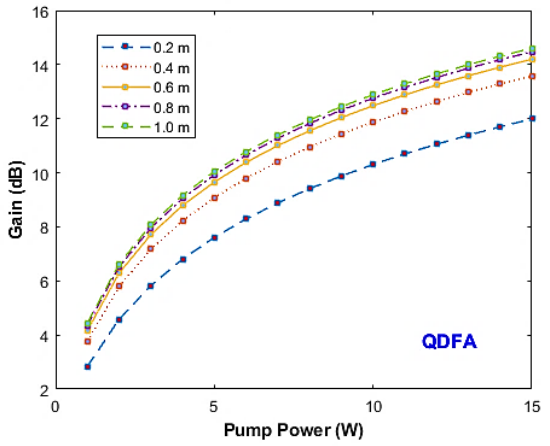
با مقایسه دو شکل درمی‌یابیم که با افزایش طول فیبر و توان دمش، بهره تقویت‌کننده به صورت غیرخطی افزایش می‌یابد تا در طول بهینه به بیشینه مقدار خود برسد. در این حالت، تقویت‌کننده به حالت بهره اشباع می‌رسد و افزایش بیشتر طول فیبر، سبب افزایش توان خروجی تقویت‌کننده نخواهد شد مگر در توان‌های دمش بالاتر. مطابق شکل ۵، بیشترین بهره در تقویت کننده QD در طول ۰٫۶ m دیده می‌شود و افزایش بیشتر طول، افت چشمگیر بهره را به دنبال دارد. در مقابل، رفتار YDFA برحسب طول کاملاً یکنواخت بود و در طول ۱ m به بیشینه مقدار خود می‌رسد که در شکل ۶ قابل مشاهده است.



شکل۴: مقایسه توان خروجی تقویت کننده در طول فیبر محیط فعال برای آلاینده‌های YDFA و QDFA در توان دمش ۱۰ W



شکل۵: بهره میزبان Yb در توان‌های دمش ۱ تا ۱۵ W در طول‌های مختلف محیط بهره

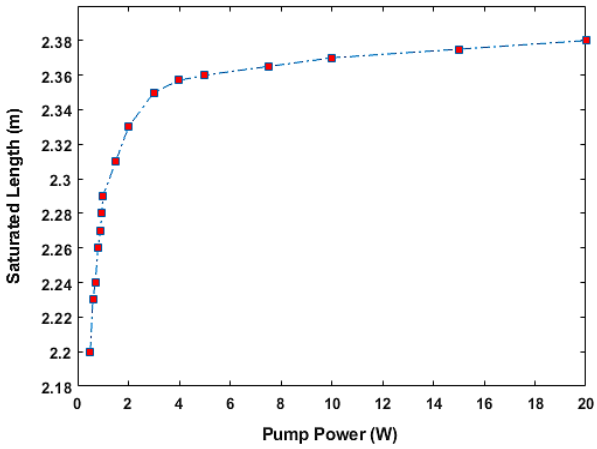


شکل۶: بهره میزبان PbSe QD در توان‌های دمش ۱ تا ۱۵ W در طول‌های مختلف محیط بهره

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

همچنین، در بیشینه مقدار توان دمش (۱۵ W)، بهره اشباع تقویت‌کننده QD تقریباً ۲ برابر تقویت‌کننده Yb است که برای رسیدن به این مقدار بهره، به فیبرهایی با طول‌های بزرگ‌تر نیازمندیم.

در نهایت، وابستگی طول اشباع به توان دمش در شکل ۷ نشان داده شده است.



شکل۷ : تغییرات بهره تقویت کننده بر حسب سایز نانو ذرات نقطه کوانتومی PbSe در توان دمش ۱۵ W و طول ۰٫۶ m

مطابق شکل، هر چه توان دمش افزایش می‌یابد، سیگنال ورودی در طول‌های بزرگ‌تری به حالت اشباع می‌رسد. افزایش طول بهینه به صورت تابع نمایی است و با رسیدن به توان ۸~ W محیط بهره به حالت اشباع رسیده و طول اشباع تقریباً ثابت باقی می‌ماند.

نتیجه‌گیری

در این مقاله، یک تقویت‌کننده فیبری تک عبوری آلاییده به PbSe QD در نظر گرفته‌شده است. سپس، پارامترهای مختلف تقویت‌کننده مانند توان دمش، طول محیط فعال، بهره و توان خروجی بررسی شده‌اند و سپس نتایج حاصل با تقویت کننده‌های متداول آلاییده به Yb مورد مقایسه قرارگرفته‌اند. نتایج نشان می‌دهند که بیشترین مقدار بهره (۱۴ dB) در QDFA با توان دمش ۱۵ W و طول ۰٫۶ m به دست می‌آید. در حالی‌که در YDFA برای رسیدن به بهره مشابه به طول‌های بزرگ‌تری نیازمند هستیم. به همین دلیل، استفاده از تقویت کننده‌های QD به دلیل بزرگ بودن سطح مقطع جذب و اشباع در طول‌های کوتاه، از نظر هزینه به صرفه و اقتصادی است.

مرجع‌ها

[1] Cheng C, Hu N, Cheng X. Experimental realization of a PbSe quantum dot doped fiber amplifier with ultra-bandwidth characteristic. *Optics Communications.* 2017 Jan 1;382:470-6.
[2] Cheng Cheng, Fangjie Wang, Xiaoyu Cheng, “PbSe quantum-dot-doped broadband fiber amplifier based on sodium-aluminum-borosilicate-silicate glass”, *Optics and Laser Technology* 122 (2020) 105812.
[3] Ching-Yi Cho, Chia-Wei Huang, Yin-Wen Lee, Chien-Ming Chen, “Experimental studies of PbS quantum dot fiber amplifier”, *The 7th IEEE International Symposium on Next-Generation Electronics (ISNE* 2018).
[4] Cheng Cheng, “A multiquantum-dot-doped fiber amplifier with characteristics of broadband, flat gain, and low noise,” *IEEE J. Lightwave Technol.*, vol. 26, no. 11, pp. 1404-1410, Jun. 2008.
[5] Chun Jiang, “Ultrabroadband Gain Characteristics of a Quantum-Dot-Doped Fiber Amplifier”, *IEEE JOURNAL OF SELECTED TOPICS IN QUANTUM ELECTRONICS*, VOL. 15, NO. 1, 2009.
[6] Cheng Cheng, Kaihua Wei, Xiaoyu Cheng, “A simulation of PbSe quantum dot-doped fiber laser”, *Conference proceeding, CLEO 2009*.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تشکیل ساختار در کیهان‌شناسی سالیس و بارو

فارسی، بیتا ؛ شیخی، احمد

بخش فیزیک- دانشکده علوم- دانشگاه شیراز

رصدخانه ابوریحان بیرونی- دانشکده علوم- دانشگاه شیراز

چکیده

در این مقاله به بررسی اثرات تصحیحات آنتروپی بر تحول اختلالات خطی ماده و انرژی تاریک می‌پردازیم. با استفاده از رمبش کروی آهنگ رشد اختلالات ماده و انرژی تاریک در مدل غیرفانتومی ($\omega_{de} > -1$) و مدل فانتومی ($\omega_{de} < -1$) را برای مدل‌های کیهان‌شناسی سالیس و بارو با یکدیگر مقایسه می‌کنیم. برای این مدل‌ها ملاحظه می‌شود که رشد اختلالات ماده و انرژی تاریک به پارامترهای مدل بستگی دارد.

واژه های کلیدی: *رمبش کروی، کیهان‌شناسی سالیس ، کیهان‌شناسی بارو .*

Structure formation in Tsallis and Barrow Cosmology

Farsi, Bita; Sheykhi, Ahmad

Department of Physics, College of Sciences, Shiraz University
Biruni Observatory, College of Sciences, Shiraz University

Abstract

In this paper, we disclose the effects of the entropic corrections on the growth of perturbations. We employ the spherically symmetric collapse formalism and work in the linear regime for the perturbations. We compare the growth of matter and dark energy perturbations in non-phantom model ($\omega_{de} > -1$) and phantom model ($\omega_{de} < -1$). We find the density contrast for matter and dark energy depends on the values of Tsallis and Barrow model parameters.

***Keywords**: Spherical collapse, Tsallis cosmology, Barrow cosmology.*

PACS No. 98

مقدمه

یک مسأله اساسی در کیهان شناسی، شروع و چگونگی تحول و تشکیل ساختارهای کیهان شناسی مانند کهکشان‌ها و خوشه‌های کهکشانی است. قابل‌قبول‌ترین پاسخ برای این پرسش، وجود ناپایداری گرانشی است که در آن، نوسانات بسیار کوچک چگالی عالم اولیه در طول تحولات عالم، به آرامی رشد می‌کنند تا اینکه به اندازه‌ی کافی بزرگ شده و از انبساط عالم پس زمینه جدا می‌شوند و درنتیجه تحت ناپایداری گرانشی رمبش می‌کنند[1]. در این فرآیند، نواحی چگال‌تر به سیستم‌های مقید گرانشی مانند کهکشان‌ها و خوشه‌های کهکشانی و نواحی با چگالی کمتر به نواحی تهی‌جا تبدیل می‌شوند [2]. یک مدل مناسب برای بررسی تحلیلی این موضوع، مدل رمبش کروی می‌باشد[3]. در این مقاله به بررسی اختلالات خطی ماده در دو مدل آنتروپی سالیس و بارو و با استفاده از مدل رمبش کروی می‌پردازیم.

رشد اختلالات در کیهان‌شناسی سالیس

اولین بار سالیس بیان کرد که آنتروپی یک سیاهچاله از قانون مساحت پیروی نمی‌کند بلکه به صورت $S_h = \gamma A^{\beta}$ تصحیح می‌گردد [4]. با استفاده از آنتروپی سالیس و

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

قانون اول ترمودینامیک بر روی افق ظاهری کیهان، می‌توان به معادلات فریدمان تصحیح شده زیر رسید[5] :

$$H^{4-2\beta}=\frac{1}{3}\sum_{i=m,de}\rho_i \quad (1)$$

$$(4-2\beta)\frac{\ddot{a}}{a}H^{2-2\beta}+(2\beta-1)H^{4-2\beta}=-\sum_{i=m,de}\omega_i\rho_i \quad (2)$$

که در این معادلات مقدار $8\pi L_p^2=1$ درنظرگرفته‌ایم. همچنین معادله (1) را می‌توان برحسب پارامترهای چگالی به صورت زیر نوشت:

(3)

$$\Omega_m+\Omega_{de}=1, \qquad \Omega_i \overset{\text{def}}{=} \frac{\rho_i}{3H^{4-2\beta}}$$

با ترکیب معادلات (1) و (2) داریم:

(4)

$$\frac{\ddot{a}}{a}=\left(\frac{3^{1-\alpha}}{2\beta-4}\right)\sum_i \rho_i^{\alpha}\left[\omega_i+\frac{1}{3}(2\beta-1)\right]$$

که در این رابطه ماده را به صورت غبار و همچنین $\alpha=(2-\beta)^{-1}$ در نظر گرفته‌ایم. همچنین به طور مشابه برای ناحیه ابر اختلالی کروی نیز می‌توان نوشت:

(5)

$$\frac{\ddot{a}_p}{a_p}=\left(\frac{3^{1-\alpha}}{2\beta-4}\right)\sum_i (\rho_i^c)^{\alpha}\left[\omega_i^c+\frac{1}{3}(2\beta-1)\right]$$

از معادله پیوستگی داریم:

(6)

$$\dot{\rho}_j+3H(1+\omega_j)\rho_j=0.$$

اکنون یک ناحیه کروی متقارن به شعاع a_p و چگالی همگن ρ_j^c در نظر می‌گیریم. مدل رمبش کروی، یک ناحیه‌ی کروی با چگالی یکنواخت را توصیف می‌کند که عبارتست از $\rho_j^c=\rho_j(t)+\delta\rho_j$. مشابه با معادله (6)، می‌توان معادله پیوستگی را برای ناحیه اختلالی کروی نوشت:

$$\dot{\rho}_j^c+3h(1+\omega_j^c)\rho_j^c=0 \quad (7)$$

که $h=\dot{a}_p/a_p$ می‌باشد. به منظور مطالعه تحول اختلالات، کمیتی بدون بعد تحت عنوان تباین چگالی را تعریف می‌کنیم[6]

$$\delta_j=\frac{\rho_j^c}{\rho_j}-1=\frac{\delta\rho_j}{\rho_j} \quad (8)$$

که ρ_j^c چگالی ابر کروی اختلالی و ρ_j چگالی عالم پس‌زمینه است. با دوبار مشتق زمانی گرفتن از معادله(8) و با استفاده از معادله (6) و (7)، رابطه زیر را خواهیم داشت:

(9)

$$\ddot{\delta}_j=3(\dot{H}-\dot{h})(1+\omega_j)(1+\delta_j)+3(H-h)\dot{\omega}_j(1+\delta_j)+\frac{\dot{\delta}_j^2}{1+\delta_j}$$

اکنون با استفاده از رابطه (4)، (5) و(8) در رابطه (9) داریم:

(10)

$$\ddot{\delta}_j-\frac{\dot{\delta}_j^2}{1+\delta_j}\left(\frac{4+3\omega_j}{3(1+\omega_j)}\right)+\dot{\delta}_j\left(\frac{2H(1+\omega_j)-\dot{\omega}_j}{(1+\omega_j)}\right)$$

$$-\frac{3^{1-\alpha}}{2(2-\beta)^2}(1+\omega_j)(1+\delta_j)\times\sum_i\rho_i^{\alpha}\delta_i[3\omega_i+(2\beta-1)]=0.$$

لازم به یادآوری است که در این معادلات دو مولفه مربوط به $j=matter,DE$ وجود دارد. پس با استفاده از رابطه (3) می‌توان این معادله (10) را برحسب ضریب مقیاس در رژیم خطی، برای مولفه های آن به صورت زیر نوشت:

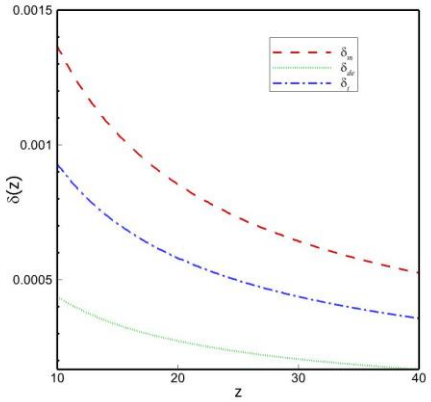
$$\acute{\delta}_m+\frac{1}{2a(\beta-2)}\{3\omega_{de}\Omega_{de}^{\alpha}+(2\beta-1)(\Omega_m^{\alpha}+\Omega_{de}^{\alpha})+4(\beta-2)\}\acute{\delta}_m$$
$$-\frac{3}{2a^2(2-\beta)^2}\{(2\beta-1)\Omega_m^{\alpha}\delta_m+\Omega_{de}^{\alpha}\delta_{de}[3\omega_{de}+(2\beta-1)]\}=0. \quad (11)$$

$$\acute{\delta}_{de}+\frac{1}{2a(\beta-2)}\{3\omega_{de}\Omega_{de}^{\alpha}+(2\beta-1)(\Omega_m^{\alpha}+\Omega_{de}^{\alpha})+4(\beta-2)\}\acute{\delta}_{de}$$
$$-\frac{3(1+\omega_{de})}{2a^2(2-\beta)^2}\{(2\beta-1)\Omega_m^{\alpha}\delta_m+\Omega_{de}^{\alpha}\delta_{de}[3\omega_{de}+(2\beta-1)]\}$$
$$-\frac{\acute{\omega}_{de}}{1+\omega_{de}}\acute{\delta}_{de}=0 \quad (12)$$

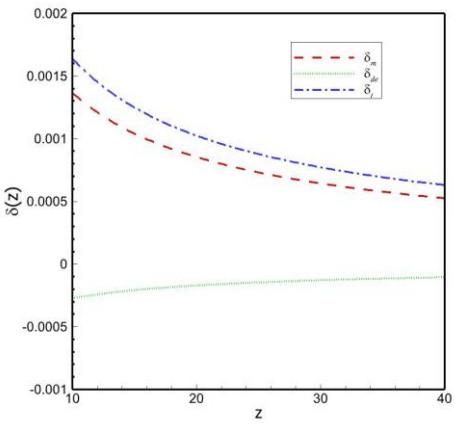
که در این رابطه‌ها علامت پریم، نشان دهنده مشتق نسبت به a است. توجه داریم که در این معادله اگر $\beta=1$ قرار دهیم، این معادله به صورت معادله مشابه در کیهان‌شناسی استاندارد درمی‌آید[7]. با حل این رابطه‌ها در ناحیه ماده غالب ($\Omega_m\approx 1$) و برای مدل‌های فانتومی وغیرفانتومی (

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

ثابت $= \omega_{de}$) تباین چگالی ماده و انرژی تاریک به دست می‌آیند که در شکل (1) برای یک مدل غیرفانتومی و در شکل (2) برای یک مدل فانتومی رسم شده است.



شکل 1 : تحول تباین چگالی ماده و انرژی تاریک برای
$\delta_m(z_i) = 0.0001$ و $\omega_{de} = -0.68$ و $\beta = 0.9$.

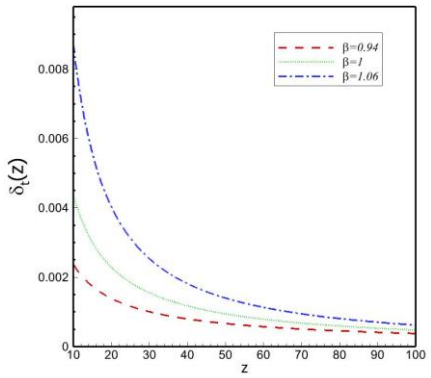


شکل 2 : تحول تباین چگالی ماده و انرژی تاریک برای
$\delta_m(z_i) = 0.0001$ و $\omega_{de} = -1.2$ و $\beta = 0.9$.

از مقایسه نمودارهای (1) و (2) ملاحظه می‌شود که تباین چگالی ماده از مقدار اولیه اش شروع به رشد می‌کند که درمدل غیرفانتومی مولفه‌ی انرژی تاریک باعث کاهش این آهنگ رشد می‌شود؛ اما در مدل فانتومی نقش افزایش رشد اختلالات را دارد.

همچنین در شکل (3) تحول اختلالات کل متشکل از ماده همراه انرژی تاریک به ازای پارامتر سالیس‌های متفاوت رسم شده است.

از این نمودار مشاهده می‌شود که پارامتر سالیس بر نحوه تحول رشد اختلالات کل تاثیر دارد.



شکل 3: رشد اختلالات کل برای پارامترهای سالیس مختلف با
$\delta_m(z_i) = 0.0001$ و $\omega_{de} = -1.2$.

رشد اختلالات در کیهان‌شناسی بارو

به طور مشابه بارو بیان کرد که قانون مساحت به صورت $S_h = (A/A_0)^{1+\Delta/2}$ تصحیح می‌شود که Δ پارامتر بارو می‌باشد [8]. درمدل بارو معادلات فریدمان به صورت زیر تصحیح می‌گردند [9]:

(13)

$$H^{2-\Delta} = \Gamma \sum_{i=m,de} \rho_i$$

$$(2-\Delta)\frac{\ddot{a}}{a}H^{-\Delta} + (1+\Delta)H^{2-\Delta} = -3\Gamma \sum_{i=m,de} \omega_i \rho_i$$

(14)

که در این معادلات داریم:

$$\Gamma \stackrel{\text{def}}{\equiv} \frac{1}{3}\left(\frac{2-\Delta}{2+\Delta}\right)\left(\frac{1}{8\pi^2}\right)^{\frac{\Delta}{2}}$$

(15)

می‌توان معادله (13) را برحسب پارامترهای چگالی به صورت زیر نوشت:

(16)

$$\Omega_m + \Omega_{de} = 1, \qquad \Omega_i \stackrel{\text{def}}{\equiv} \frac{\Gamma \rho_i}{H^{2-\Delta}}$$

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

با روشی مشابه روش بیان شده در بخش قبل، رابطه زیر به دست می‌آید:

(17)

$$\ddot{\delta}_j - \frac{\dot{\delta}_j^2}{1+\delta_j}\left(\frac{4+3\omega_j}{3(1+\omega_j)}\right) + \dot{\delta}_j\left(\frac{2H(1+\omega_j)-\dot{\omega}_j}{(1+\omega_j)}\right)$$

$$-\frac{6(1+\delta_j)}{(2-\Delta)^2}(1+\omega_j)\left\{\sum_i(\Gamma\rho_i)^\lambda\delta_i[(1+\Delta)+3\omega_i]\right\}=0,$$

که در این معادله $\lambda = 2/(2-\Delta)$ است. اکنون با استفاده از رابطه (16) می‌توان این معادله (17) را برحسب ضریب مقیاس در رژیم خطی، برای مولفه های آن به صورت زیر بازنویسی کرد:

(18)

$$\acute{\delta}_m - \frac{1}{a(2-\Delta)}\left\{3\omega_{de}\Omega_{de}^\lambda + (1+\Delta)(\Omega_m^\lambda+\Omega_{de}^\lambda)+2(\Delta-2)\right\}\acute{\delta}_m$$
$$-\frac{6}{a^2(2-\Delta)^2}\left\{(1+\Delta)\Omega_m^\lambda\delta_m + \Omega_{de}^\lambda\delta_{de}[(1+\Delta)+3\omega_{de}]\right\}=0.$$

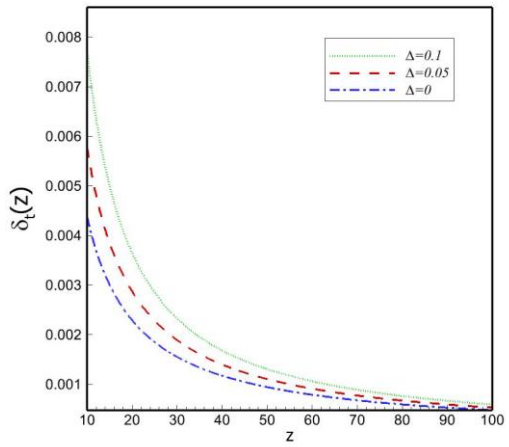
(19)

$$\acute{\delta}_{de} - \frac{1}{a(2-\Delta)}\left\{3\omega_{de}\Omega_{de}^\lambda + (1+\Delta)(\Omega_m^\lambda+\Omega_{de}^\lambda)+2(\Delta-2)\right\}\acute{\delta}_{de}$$
$$-\frac{6}{a^2(2-\Delta)^2}(1+\omega_{de})\{(1+\Delta)\Omega_m^\lambda\delta_m + \Omega_{de}^\lambda\delta_{de}[(1+\Delta)+3\omega_{de}]\}$$
$$-\frac{\acute{\omega}_{de}}{1+\omega_{de}}\acute{\delta}_{de}=0.$$

لازم به ذکر است که اگر $\Delta = 0$ قرار دهیم، این معادله به صورت معادله مشابه در کیهان‌شناسی استاندارد درمی‌آید[7]. با حل این رابطه‌ها در ناحیه ماده غالب (یعنی $\Omega_m \approx 1$) و برای مدل‌های فانتومی و غیرفانتومی، تباین چگالی ماده و انرژی تاریک به دست می‌آیند که در شکل (4) برای پارامتر باروهای متفاوت رسم شده است. همانطور که از نمودار ملاحظه می‌گردد، پارامتر بارو در تحول رشد اختلالات ماده به همراه انرژی تاریک نقش دارد.

نتیجه‌گیری

در این مقاله، با استفاده از مدل رمبش کروی و معادلات فریدمان تصحیح شده در کیهانشناسی سالیس/ بارو رشد اختلالات ماده و انرژی عالم بررسی گردید. ملاحظه گردید که برای هر دو مدل سالیس و بارو، در نظرگرفتن مولفه انرژی تاریک به صورت مدل فانتومی آهنگ رشد اختلالات و درنتیجه تشکیل ساختارهای بزرگ‌مقیاس را افزایش می‌دهد اما در مدل غیرفانتومی نقش مخالف را دارد. همچنین مشاهده شد که در مدل فانتومی آهنگ رشد اختلالات کل در کیهان‌شناسی سالیس می‌تواند آهسته‌تر یا سریع‌تر از مدل استاندارد باشد و بستگی به مقدار پارامتر سالیس دارد اما در کیهان‌شناسی بارو همواره سریع‌تر از مدل استاندارد است.



شکل4 : رشد اختلالات کل برای پارامترهای بارو مختلف با $\delta_m(z_i) = 0.0001$ و $\omega_{de} = -1.2$.

مرجع‌ها

[1] P. Peebles; "*Principles of Physical Cosmology"*; Princeton University Press. (1993).
[2] S. D. M. White, M. J. Rees; "Core condensation in heavy halos: a two-stage theory for galaxy formation and clustering"; *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* **183**, No. 3 (1978) 341–358.
[3] S. Planelles, D. Schleicher, A. Bykov; "Large- scale structure formation: from the first non-linear objects to massive galaxy clusters"; *Space Science Reviews. Rev* **188** (2015) 93-139.
[4] C. Tsallis, L. J. L. Cirto, "Black hole thermodynamical entropy", *Eur. Phys. J. C* **73** (2013) 2487.
[5] A. Sheykhi, "Modified Friedmann equations from Tsallis entropy", *Phys. Lett. B* **785** (2018) 118.
[6] A. Ziaie, H. Shabani, S. Ghaffari, "Effects of Rastall parameter on perturbation of dark sectors of the Universe", *Mod. Phys. Lett. A* **36** (2021) 2150082.
[7] R. Abramo, R. Batista, L. Liberato and R.Rosenfeld, "Structure formation in the presence of dark energy perturbations", *JCAP* **11** (2007) 012.
[8] J. D. Barrow, "The area of a rough black hole", *Phys. Lett B* **808** (2020) 135643.
[9] A. Sheykhi, "Barrow Entropy Corrections to Friedmann Equations", *Phys. Rev. D* **103** (2021) 123503.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

پیشنهادی برای لاگرانژی نظریه های گرانشی راستال

حمید شعبانی[۱]، امیرهادی ضیایی[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان

[۲] مرکز تحقیقات نجوم و اختر فیزیک مراغه، مراغه

چکیده

در این مقاله با بررسی رابطه بین معادلات میدان دو نظریه راستال استاندارد و راستال تعمیم یافته با گرانش $f(R,T)$ لاگرانژی هایی برای دو نظریه نامبرده اول بدست می آوریم. فرض شده است که کیهان شامل ماده کامل با معادله حالت خطی باشد. در خواهیم یافت که لاگرانژی مدل های ذکر شده توابع خطی از ناوردای ریچی R و رد تانسور انرژی-تکانه T می باشد.

واژه های کلیدی: *گرانش تعمیم یافته، تانسور انرژی-تکانه، صورت بندی لاگرانژی*

A suggestion for the Lagrangian of Rastall gravitational theories

Hamid Shabani[1], Amir Hadi Ziaie[2]

[1] *Department of Physics, University of Sistan and Baluchestan, Zahedan*
[2] *Research Institute for Astronomy and Astrophysics of Maragha (RIAAM), P.O. Box 55134-441, Maragha, Iran*

Abstract

In this paper by investigating the relation between the field equations of the standard and the generalized Rastall and $f(R,T)$ gravities, we obtain a Lagrangian formulation for the two mentioned Rastall theories. It is assumed that the Universe includes a perfect fluid with linear equation of state. We find that the Lagrangians of the Rastall theories become functions of the Ricci scalar R and the trace of the energy-momentum tensor T.

***Keywords**: Modified gravity, energy-momentum tensor, Lagrangian formalism*

PACS No.: ۲,۱۱

مقدمه

راستال (P. Rastall) در سال ۱۹۷۲ معادله استاندارد قانون بقای انرژی، $\nabla^{\mu}T_{\mu\nu}=0$ را مورد چالش قرار داد [۱]. نقطه شروع راستال این بود که شکل استاندارد معادله پایستگی تنها در نسبیت خاص مورد بررسی قرار گرفته و هیچ سند آزمایشگاهی مبنی بر برقراری آن در فضا-زمان های خمینه وجود ندارد. در نتیجه راستال به این نتیجه رسید که "همه فرض هایی که فرد را به نتیجه $\nabla^{\mu}T_{\mu\nu}=0$ می رسانند قابل چالش هستند، در نتیجه فرد نباید این پرسش را بدون تحقیقات بیشتر بپذیرد" [۱]. او در ابتدا فرض $\nabla^{\nu}T_{\mu\nu}=a_{\mu}$ را مطرح کرد، که در آن میدان برداری a^{β} در فضا زمان تخت می بایست صفر شود. سپس، او برای این میدان برداری ساده ترین شکلی که به ناوردای ریچی وابسته است را به صورت $a^{\beta}=\lambda\nabla^{\beta}R$ برگزید. در عبارت ذکر شده، λ را پارامتر جفت شدگی راستال می گویند که مقدار ثابتی است. در این صورت به این نظریه، گرانش راستال استاندارد (SRG) گفته می شود. پژوهش های زیادی روی این نظریه انجام شده که مؤلف به ذکر یکی از آنها که توسط او و همکارانش انجام شده بسنده می کند [۲]. راستال در چالشی که مطرح کرد مجال نامحدودی در انتخاب معادله های پایستگی آفرید. در این راستا، تعمیم هایی از SRG پیشنهاد شدند. به عنوان نمونه، در مقاله [۳]، نگارندگان یک پارامتر متغیر راستالی

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

که به مختصات فضا-زمان بستگی دارد و به صورت $\nabla^{\nu}T_{\nu\mu}=\nabla_{\mu}(\lambda' R)$ ظاهر می شود را معرفی کرده اند. این نظریه با عنوان گرانش راستال تعمیم یافته (GRG) شهرت یافته است. چنین تعمیمی، می تواند دوره های پیش-تورم و پسا-تورم را به تصویر بکشد [۳]. تعمیم دیگری به صورت $\nabla^{\nu}T_{\mu\nu}=\lambda\nabla_{\mu}f\ (R)$ در مقاله [٤] بررسی شده است که می تواند حل های سیاه چاله ای که از نظر الکتریکی و مغناطیسی خنثی هستند را بدست دهد. از آنجایی که SRG و GRG از فقدان لاگرانژی هایی که بتوانند معادلات میدان آن ها را بدست دهند رنج می برند، پژوهش در این راستا از اولویت بالایی برخوردار است. از تحقیقات انجام شده در این زمینه می توان به گزارش [۵] اشاره کرده که در آن در چارچوب نظریه های جفت شدگی خمش-ماده[1] یک لاگرانژی برای SRG بدست آمده است. در همین زمینه، مقاله حاضر به بررسی راه حل دیگری برای چالش لاگرانژی نظریه های راستال از طریق ارتباط بین معادلات میدان این مدل ها با معادلات میدان گرانش $f\ (R,T)$ می پردازد. در ادامه، ابتدا معرفی اجمالی از معادلات اصلی نظریه های نامبرده انجام شده، سپس به بحث درمورد لاگرانژی های SRG و GRG می پردازیم.

معادلات میدان در مدل گرانشی $f(R,T)$

در این بخش کمیتهای مورد نیاز را بدست می آوریم. کنش مربوط به مدل گرانشی $f(R,T)$ به صورت زیر نوشته می شود

$$S=\int\sqrt{-g}d^{4}x[\frac{1}{2\chi}f\ (R,T)+L^{(m)}], \qquad (۱)$$

که در آن T رد تانسور انرژی مومنتوم مربوط به ماده و $L^{(m)}$ لاگرانژی کل ماده است. g دترمینان متریک است، $\chi=8\pi G$ و همچنین $c=1$ قرار داده شده است. معادلات میدان به صورت زیر بدست می آیند

$$f_{,R}(R,T)R_{\mu\nu}-\frac{1}{2}f\ (R,T)g_{\mu\nu}+(g_{\mu\nu}\Box-\nabla_{\mu}\nabla_{\nu})f_{,R}(R,T)= \qquad (۲)$$
$$[\chi+f_{,T}(R,T)]T_{\mu\nu}-f_{,T}(R,T)pg_{\mu\nu}$$

که در معادله فوق $f_{,R}(R,T)$ و $f_{,T}(R,T)$ به ترتیب مشتق نسبت به ناوردای ریچی و رد تانسور انرژی-تکانه می باشند. با اعمال اتحاد بیانکی روی معادله میدان (۲) به عبارت زیر می رسیم

$$(\chi+f_{,T})\nabla^{\mu}T_{\mu\nu}+\frac{1}{2}f_{,T}\nabla_{\nu}T+T_{\mu\nu}\nabla^{\mu}f_{,T} \qquad (۳)$$
$$-\nabla_{\mu}(pf_{,T})=0$$

که برای اختصار کمان (R,T) نوشته نشده است. صورت استاندارد معادله (۳) به شکل زیر است

$$\nabla^{\mu}T_{\mu\nu}=\frac{\nabla_{\mu}(pf_{,T})-\frac{1}{2}f_{,T}\nabla_{\nu}T-T_{\mu\nu}\nabla^{\mu}f_{,T}}{\chi+f_{,T}} \qquad (٤)$$

معادلات میدان مدل های گرانشی راستال

در این قسمت به طور خلاصه معادلات میدان دو نظریه SRG و GRG را مرور می کنیم. همانطور که در مقدمه ذکر شد راستال نسخه (SRG) را به صورت زیر برای معادله پایستگی پیشنهاد کرد

$$\nabla^{\mu}T_{\mu\nu}=\lambda\nabla_{\mu}R, \qquad (۵)$$

که در آن λ ثابتی است که محدوده اعتبار آن می تولند از طریق بررسی های رصدی مشخص می شود. از معادله (۵) می توان معادله میدان زیر را بدست آورد

$$G_{\mu\nu}+\lambda\kappa Rg_{\mu\nu}=\kappa T_{\mu\nu}, \qquad (٦)$$

که κ ثابت گرانشی راستال نامیده می شود. دقت کنید که در حالت کلی داریم $\kappa\neq\chi$. با محاسبه رد معادله (٦) دو معادله فوق برای استفاده در بخش بعدی به صورت زیر بازنویسی می شوند

$$G_{\mu\nu}=\kappa T_{\mu\nu}-\frac{\lambda\kappa^{2}}{4\lambda\kappa-1}Tg_{\mu\nu}, \qquad (۷)$$

$$\nabla^{\nu}T_{\mu\nu}=\frac{\lambda\kappa}{4\lambda\kappa-1}\nabla_{\nu}T. \qquad (۸)$$

به طور مشابه برای GRG معادلات زیر را داریم

$$G_{\mu\nu}+\lambda'\kappa' Rg_{\mu\nu}=\kappa' T_{\mu\nu}, \qquad (۹)$$

$$\nabla^{\nu}T_{\mu\nu}=\nabla_{\nu}(\lambda' R), \qquad (۱۰)$$

که اعمال رد معادله (۹) روی معادله (۱۰) نتیجه زیر را بدست می دهد

$$\nabla^{\nu}T_{\mu\nu}=\nabla_{\nu}(\frac{\lambda'\kappa' T}{4\lambda'\kappa'-1}). \qquad (۱۱)$$

[1] Curvature-matter coupling theories

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

خواننده باید توجه داشته باشد که برخلاف SRG در GRG پارامتر راستال، یعنی λ' تابع مختصات فضا-زمان است. در بخش بعدی نشان می دهیم که می توان از طریق روابط مربوط به گرانش $f(R,T)$ برای نظریه های راستال لاگرانژی نوشت.

بازسازی لاگرانژی نظریه راستال استاندارد (SRG)

در این بخش تلاش می کنیم لاگرانژی مناسبی برای SRG بدست آوریم. از آنجایی معادله میدان (٦) شامل مشتقات ناوردای ریچی نیست با مقایسه آن با معادله (٢) در می یابیم که با جایگذاری توابعی به صورت $f(R,T)=R+\alpha T$ در معادله میدان (٢) می توان معادله میدان (٦) را بدست آورد. در این صورت از معادله (٢) داریم

$$G_{\mu\nu}=(\chi+\alpha)T_{\mu\nu}+\alpha(\frac{T}{2}-p)g_{\mu\nu}, \qquad (١٢)$$

برای یک ماده کامل با $p=w\rho$ رد تانسور انرژی-تکانه $T=-\rho+3p=(3w-1)\rho$ می شود که با جایگذاری آن در (١٢) خواهیم داشت

$$G_{\mu\nu}=(\chi+\alpha)T_{\mu\nu}+\alpha\frac{w-1}{2(3w-1)}Tg_{\mu\nu}. \qquad (١٣)$$

حال با مقایسه معادله (١٣) با معادله (٧) ثابت α ای که می تواند معادله (٦) را از معادله (٢) بدست دهد به صورت زیر بدست می آید

$$\alpha=\frac{2(1-3w)\lambda\kappa^2}{(w-1)(4\lambda\kappa-1)}. \qquad (١٤)$$

با انتخاب (١٤) خواننده می تواند تحقیق کند که دو معادله پایستگی (٤) و (٨) صورت یکسانی خواهند داشت. در نتیجه، برای SRG لاگرانژی $f(R,T)=R+\alpha T$ با ثابتی که در (١٤) بدست آمد، می تواند معادلات حرکت درستی را بدست دهد.

بازسازی لاگرانژی نظریه راستال تعمیم یافته (GRG)

در این حالت از لاگرانژی $f(R,T)=R+h(T)$ استفاده می کنیم. با جایگذاری آن در معادله میدان (٢) به عبارت زیر می رسیم

$$G_{\mu\nu}=(\kappa+\frac{dh}{dT})T_{\mu\nu}+(\frac{h}{2}-p\frac{dh}{dT})g_{\mu\nu}, \qquad (١٥)$$

که با مقایسه نتیجه (١٥) با معادله (٩) خواهیم داشت

$$\kappa'=\chi+\frac{dh}{dT}, \qquad (١٦)$$

$$\lambda'=\frac{\frac{h}{2}-p\frac{dh}{dT}}{(\chi+\frac{dh}{dT})[T(\chi+\frac{dh}{dT})+4(\frac{h}{2}-p\frac{dh}{dT})]}. \qquad (١٧)$$

چون κ' مقدار ثابتی است با انتگرال گیری از (١٦) پاسخ $h(T)=(\kappa'-\chi)T+\beta$ که β ثابت انتگرال گیری است را بدست می آوریم. با جایگذاری این پاسخ در (١٧) خواهیم داشت (١٨)

$$\lambda'=\frac{1}{4}(\frac{(3w-1)T}{[2(w-1)\chi+(3-5w)\kappa']T+2\beta(1-3w)}+\frac{1}{\kappa'}).$$

تنها بررسی بررسی دو معادله پایستگی (٤) و (١٠) می ماند. برای پاسخ $h(T)=(\kappa'-\chi)T+\beta$ معادله (٤) برابر است با

$$\nabla^{\mu}T_{\mu\nu}=\frac{1-w}{2(3w-1)}\frac{\kappa'-\chi}{\kappa'}\nabla_{\nu}T, \qquad (١٩)$$

در حالی که برای معادله پایستگی (١٠) داریم

$$\nabla^{\mu}T_{\mu\nu}=\kappa'(\frac{\lambda'}{4\kappa'\lambda'-1}-\frac{T\,d\lambda'/dT}{(4\kappa'\lambda'-1)^2})\nabla_{\nu}T. \qquad (٢٠)$$

از تساوی دو معادله (١٩) و (٢٠) معادله دیفرانسیلی حاصل می شود که حل آن همان معادله (١٨) است به شرطی که ثابت انتگرال گیری را برابر با $-\beta/2\kappa'^2$ بگیریم. در نتیجه لاگرانژی بدست آمده برای GRG عبارت از $f(R,T)=R+(\kappa'+\chi)T-\beta/2\kappa'^2$ است.

نتیجه گیری

در این مقاله، لاگرانژی هایی برای دو SRG و GRG با استفاده از مقایسه معادلات میدان شان با معادله میدان گرانش $f(R,T)$ بدست آورده ایم. این پاسخ ها که وابسته به رد تانسور انرژی-تکانه هستند به ترتیب برابر با $f(R,T)=R+\alpha T$ با ثابت مندرج در عبارت (١٤) و $f(R,T)=R+(\kappa'+\chi)T-\beta/2\kappa'^2$ برای یک β دلخواه هستند. با استفاده از این دو لاگرانژی، معادلات میدان دو نظریه ذکر شده به ترتیب (٦) و (٩) و همچنین معادلات پایستگی آنها به ترتیب (٥) و (١٠) بدست می آیند. بدیهی است که جواب های بدست آمده خالی از اشکال نیستند، مثلاً، برای حالتهای

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$w = \frac{1}{3}, 1$ به دلیل اینکه روابط (۱٤) و (۱۹) تکین می شوند باید رهیافت حاضر دوباره ارزیابی شود. پژوهش حاضر تنها تلاش کوچکی در راستای حل مشکل لاگرانژی نظریه های راستال می باشد.

مرجع‌ها

[1] P. Rastall, *Generalization of the Einstein Theory*, *Phys. Rev. D*, **6** (1972) 3357.
[2] Ziaie A. H., Shabani H. and Ghaffari S., *Effects of Rastall parameter on perturbation of dark sectors of the Universe*, Mod. Phys. Lett. A, **30**, 2150082 (2021).
[3] H. Moradpour, Y. Heydarzade, F. Darabi, Ines G. Salako, *A generalization to the Rastall theory and cosmic eras*, *Eur. Phys. J. C* ,**77** (2017) 259.
[4] K. Lin, W.-L. Qian, *Neutral regular black hole solution in generalized Rastall gravity*, *Chi. Phys. C*, **43** (2019) 083106.
[5] De Moraes W. A. G. and Santos A. F., *Lagrangian formalism for Rastall theory of gravity and Gödel-type universe*, Gen. Relativ. Gravit., 51, 167 (2019).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

رسانش الکتریکی اتصال فلز نرمال-نیمه فلز وایل- فلز نرمال

لطفی ، جعفر ؛ عبداللهی‌پور، بابک*
گروه فیزیک ماده چگال، دانشکده فیزیک، دانشگاه تبریز، تبریز
*Email: b-abdollahi@tabrizu.ac.ir

در این مقاله ما رفتار رسانش الکتریکی در اتصالی شامل فلز نرمال و نیمه فلز وایل نوع یک را با استفاده از رویکرد پراکندگی مورد مطالعه قرار می‌دهیم. با استفاده از هامیلتونین های ارایه شده برای بخش‌های مختلف اتصال توابع موج را در هر قسمت بدست آورده و با استفاده از شرایط مرزی، تراگسیلندگی و رسانندگی الکتریکی را بر حسب مقادیر قدرت اسپین اربیت و انرژی فرمی و محل نقطه وایل محاسبه و مقایسه می‌کنیم.
واژه های کلیدی: *نیمه فلز وایل،رویکرد پراکندگی، رسانش الکتریکی.*

Electrical conductance of junction of Normal metal-Weyl semimetal-Normal metal

Lotfi, Jafar[1]; Abdollahipour, Babak[1]

[1] *Department of Physics, University of Tabriz, Tabriz,*

Abstract

In this paper, we study the behavior of electronic transport in a junction consisting of normal metal and weyl semimetal using the scattering approach.We calculate wave functions in each part of junction, by using the hamiltonians of different parts of the junction. We calculate and compare transmittance and electrical conductance for different spin-orbit strengths, fermi level energies and weyl point locations.
***Keywords**: weyl semimetal, scaterring matrix,electrical conductance, conductance*

PACS No.

مقدمه

نیمه فلزات وایل سیستم‌های سه بعدی ای هستند که طیف پاشندگی آنها اطراف نقاط تماس نوارهای ظرفیت و رسانش (نقاط وایل) خطی هستند و توسط توپولوژی و تقارن حفظ می شوند تفاوت اساسی بین این مواد سه بعدی با گرافن دوبعدی در این است که ساختار نواری بدون گاف آنها در مقابل اختلالات کوچک همچنان بدون گاف باقی می ماند. اگردر نیمه فلزات دیراک تقارن فضایی و یا تقارن وارونی زمان شکسته شود نقاط دیراک به یک جفت نقاط وایل تبدیل می شوند که نقاط وایل در فضای اندازه حرکت و یا انرژی از هم جدا می-شوند که این نقاط کایرالیتی مخالف داشته و همواره به صورت جفت ظاهر می‌شوند[1].

ما در این مقاله می‌خواهیم با استفاده از رویکرد ماتریس پراکندگی تراگسیلندگی و رسانش الکتریکی را محاسبه کنیم. برای این مهم ابتدا هامیلتونین های مناسب با هرقسمت از اتصال مورد بررسی را بیان کنیم و سپس با استفاده از حل معادلات ویژه مقداری پاشندگی انرژی هر قسمت را بدست بیاوریم و با استفاده از به کار بردن شرایط مرزی مناسب برای مسئله از روی ویژه توابع مرتبط با هر قسمت با استفاده از حل معادلات چند مجهولی متناسب با مسئله ضرایب عبور برای هر مد را محاسبه کنیم. و از روی ضرایب عبور می‌توانیم احتمال عبور و سهم رسانندگی هر مد را مورد بررسی قرار دهیم .

معادلات اساسی و بیان مسئله:

ما اتصالی را طبق شکل (۱) فرض میکنیم، که در آن طرف‌های چپ و راست تصویررا فلز معمولی وبخش میانی اتصال را نیمه فلز وایل نوع یک تشکیل داده است.
هامیلتونین ناحیه فلز نرمال را به صورت زیر در نظر می-گیریم[2]:

$$H_N = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)\sigma_0 + \mu_N\sigma_0 \qquad (1)$$

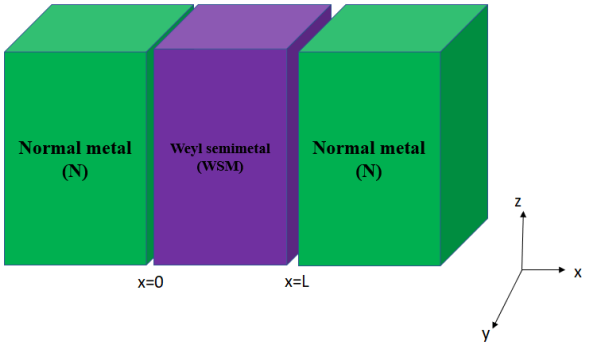
که در آن k نشان دهنده‌ی بردار موج ، σ_0 ماتریس واحد و μ_N پتانسیل شیمیایی می‌باشند.
و هامیلتونی قسمت وسط اتصال را در این مقاله به صورت زیر در نظر می‌گیریم[2]:

$$H_{WSM} = \varepsilon_k\sigma_z + \lambda(k_x\sigma_x + k_y\sigma_y) + \mu_{WSM}\sigma_0 \qquad (2\text{-a})$$

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 - k_0^2\right) \qquad (2-b)$$

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

که در آن σ_x ، σ_y و σ_z ماتریس‌های پائولی، λ قدرت اسپین-اربیت و $\pm k_0$ بردار موج نقاط وایل در نیمه رسانای وایل نوع یک مورد بررسی است.



شکل ۱ -طرح شماتیک از اتصال فلز نرمال-نیمه فلز وایل- فلز نرمال را نشان می‌دهد.

با در نظر گرفتن $E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$ می‌توان ویژه مقادیر و ویژه توابع H_N به صورت زیر بدست آورد:

$$k_N^{\pm} = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \pm k_F \qquad (3)$$

$$\psi_N^{\uparrow} = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \quad ; \psi_N^{\downarrow} = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \qquad (4)$$

برای H_{WSM} نیز ویژه توابع و ویژه مقادیر به صورت زیر قابل محاسبه است، لازم به ذکر است که در محاسبات زیر $\hat{\lambda} = \lambda * k_F^2$ به منظور بی بعد کردن محاسبات در نظر گرفته شده است:

$$k_x^{\uparrow} = \pm\sqrt{k_0^2 - k_y^2 - k_z^2 - \frac{\hat{\lambda}^2}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{4k_F^2 - 4k_0^2\hat{\lambda}^2 + 4k_z^2\hat{\lambda}^2 + \hat{\lambda}^4}} \qquad (5)$$

$$k_x^{\downarrow} = \pm\sqrt{k_0^2 - k_y^2 - k_z^2 - \frac{\hat{\lambda}^2}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{4k_F^2 - 4k_0^2\hat{\lambda}^2 + 4k_z^2\hat{\lambda}^2 + \hat{\lambda}^4}} \qquad (6)$$

$$k_x^{\uparrow} \equiv k_{wp}; \qquad k_x^{\downarrow} \equiv k_{wp} \qquad (7)$$

$$\psi_{WSM}^{\uparrow} = \begin{pmatrix}1\\ \frac{\hat{\lambda}(k_{wp} + ik_y)}{k_F^2 + \varepsilon_{kp}}\end{pmatrix} \qquad (8)$$

$$\psi_{WSM}^{\downarrow} = \begin{pmatrix}\frac{\hat{\lambda}(k_{wp} - ik_y)}{k_F^2 - \varepsilon_{kp}}\\ 1\end{pmatrix} \qquad (9)$$

$$\varepsilon_{kp} = k_{wp}^2 + k_y^2 + k_z^2 - k_0^2 \qquad (10)$$

$$\varepsilon_{km} = k_{wm}^2 + k_y^2 + k_z^2 - k_0^2 \qquad (11)$$

می‌توان تابع موج را برای ناحیه $x \prec 0$ به صورت زیر نوشت:

$$\psi_{left}^{N,\uparrow}(x,y) = \psi_N^{\uparrow} e^{ik_N^{\uparrow}x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} + r_{\uparrow\uparrow}\psi_N^{\uparrow} e^{ik_N^{\uparrow}x} e^{ik_y y} e^{ik_z z}$$
$$+ r_{\downarrow\uparrow}\psi_N^{\downarrow} e^{ik_N^{\downarrow}x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} \qquad (12)$$

$$\psi_{left}^{N,\downarrow}(x,y) = \psi_N^{\downarrow} e^{ik_N^{\downarrow}x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} + r_{\downarrow\uparrow}\psi_N^{\uparrow} e^{ik_N^{\uparrow}x} e^{ik_y y} e^{ik_z z}$$
$$+ r_{\downarrow\downarrow}\psi_N^{\downarrow} e^{ik_N^{\downarrow}x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} \qquad (13)$$

که در آن $r_{n,m}$ ها ضرایب بازتاب در حالات مختلف می‌باشد.

تابع موج در ناحیه وسط $0 < x < L$ نیز به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\psi_{center}^{WSM}(x,y) = a\psi_{WSM}^{\uparrow} e^{ik_{wp}x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} + b\psi_{WSM}^{\uparrow} e^{-ik_{wp}x} e^{ik_y y} e^{ik_z z}$$
$$+ c\psi_{WSM}^{\downarrow} e^{ik_{wm}x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} + d\psi_{WSM}^{\downarrow} e^{-ik_{wm}x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} \qquad (14)$$

برای ناحیه سمت راست x>L نیز تابع موج به صورت زیر نوشته می‌شود:

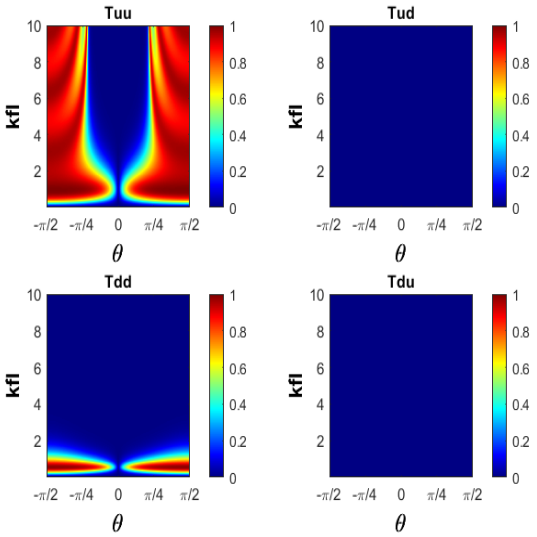
$$\psi_{Right}^{N,\uparrow}(x,y) = t_{\uparrow\uparrow}\psi_N^{\uparrow} e^{ik_N^{\uparrow}x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} + t_{\uparrow\downarrow}\psi_N^{\downarrow} e^{ik_N^{\downarrow}x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} \qquad (15)$$

$$\psi_{Right}^{N,\downarrow}(x,y) = t_{\downarrow\uparrow}\psi_N^{\uparrow} e^{ik_N^{\uparrow}x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} + t_{\downarrow\downarrow}\psi_N^{\downarrow} e^{ik_N^{\downarrow}x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} \qquad (16)$$

که در آن $t_{n,m}$ ها ضرایب عبور در حالت‌های مختلف را نشان می‌دهد. برای بدست آوردن ضرایب عبور نیاز به حل هشت معادله‌ی هشت مجهولی بدست آمده از دو شرط برابری توابع موج و شار عبوری در مرزها استفاده می‌کنیم.

نتیجه گیری

با توجه به آنچه در بخش قبلی بیان شد با حل شرایط مرزی مذکور تراگسیلندگی $T_{n,m} = \frac{k_{N\,right}}{k_{N\,left}}\left|t_{n,m}\right|^2$ حالت‌های مختلف را به ازای مقادیرمختلف پارامترهای های متفاوت بررسی می کنیم.

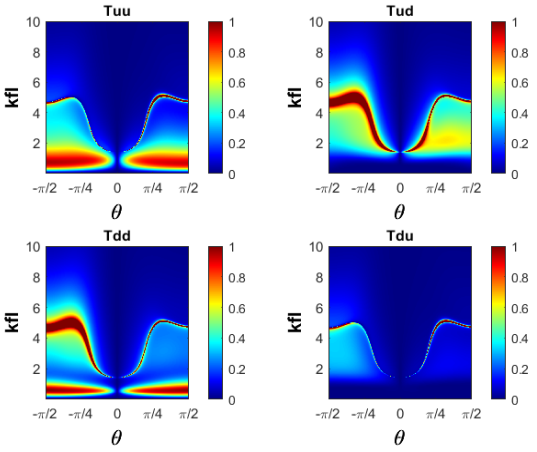


شکل ۲ - تراگسیلندگی بر حسب زاویه ی سمتی و kfl را برای مدهای مختلف نشان می‌دهد. در نمودار بالا مقادیر $\mu_{N\,right} = -2$ ، $\mu_{N\,left} = -0.5$ $\mu_{WSM} = 0 \cdot \varphi = 10^{\circ} \cdot k_{0l} = 1\,\lambda = 0$ فرض شده است.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

شکل‌های ۲، ۳ و۴ تراگسیلندگی مدهای مختلف را برحسب θ (محور افقی) و kfl (محور عمودی) به ازای مقادیر متفاوت φ نشان می‌دهد. همانطور که از ستون رنگی همراه نمودارها پیداست، به ازای مقادیر مختلف از صفر تا یک تراگیسلندگی رنگ‌های متفاوت اختصاص داده شده است.

آنچه از نمودارهای شکل۳ پیداست، به دلیل حضور اثر اسپین اربیت نمودارها نامتقارن هستند حال آنکه در نمودارهای متناظر در شکل ۲ که با $\lambda = 0$ رسم شده‌اند، نمودارهای حاصل کاملا متقارن هستند و نقاط قهوه ای رنگ برای مد $T_{\uparrow\uparrow}$(Tuu) بسیار بیشتر است، اما در سایر مدهای تراگیسلندگی نقاط با احتمال عبور صفر بسیار در دسترس‌ترند.



شکل ۳- تراگسیلندگی بر حسب زاویه ی سمتی و kfl را برای مدهای مختلف نشان می‌دهد. در نمودار بالا مقادیر $\mu_{WSM} = 0, \varphi = 10^\circ, k_{0l} = \lambda = 1$ $\mu_{N\,left} = -0.5$ ، $\mu_{N\,right} = -2$ فرض شده است.

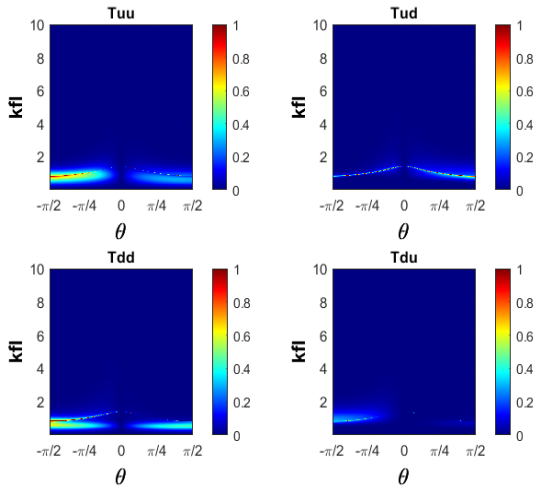
همچنین با مقایسه‌ی نمودارهای شکل‌های ۳و ۴ می‌توان نتیجه گرفت با افزایش زاویه‌ی φ احتمال عبور در تمامی مدهای تراگسیلندگی کاهش محسوسی پیدا می‌کنند. اما همچنان به دلیل حضور اثر اسپین-اربیت در نمودارهای شکل۴، نمودارها همچنان نامتقارن هستند.

حال می‌خواهیم رسانش الکتریکی را برای مقادیر مختلف پارامترهای گوناگون به دست آوریم و نتایج حاصل را مقایسه کنیم. رسانندگی الکتریکی با استفاده از معادله‌ی زیر قابل محاسبه است [3]:

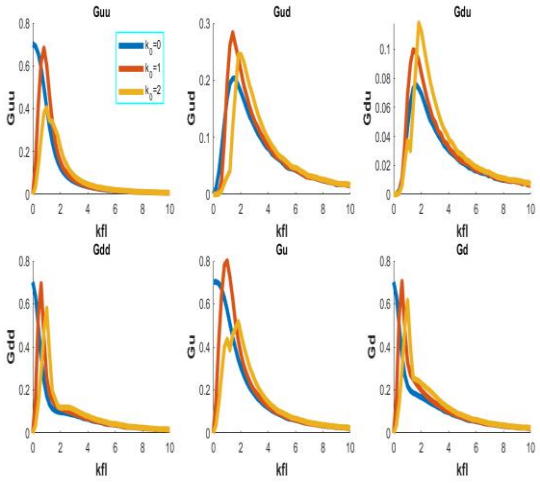
$$G_n = G_0 \int_0^{\pi/2} \int_0^{2\pi} T_{n,n}(E_F, \varphi, \theta) \cos(2\theta) d\varphi d\theta \quad (17)$$

که در آن $G_0 = \frac{2e^2W}{\pi^2\hbar^2}$، φ زاویه‌ی سمتی بردار موج و θ زاویه ی قطبی است.

شکل(۵) رفتار رسانندگی الکتریکی $\frac{G}{G_0}$ (محور عمودی) برحسب کمیت بی بعد شده‌ی kfl (محور افقی) که معیاری از انرژی فرمی می‌باشد را به ازای مقادیر متفاوت k0l نشان می‌دهد. همانطور که از نمودارها پیداست، با افزایش k0l نقطه‌ی بیشینه ی رسانش الکتریکی به سمت راست(انرژی های فرمی بزرگتر) منتقل می‌شود.



شکل ۴- تراگسیلندگی بر حسب زاویه ی سمتی و kfl را برای مدهای مختلف نشان می‌دهد. در نمودار بالا مقادیر $\mu_{WSM} = 0, \theta = 80^\circ, k_{0l} = \lambda = 1$ $\mu_{N\,left} = -0.5$ ، $\mu_{N\,right} = -2$ فرض شده است.

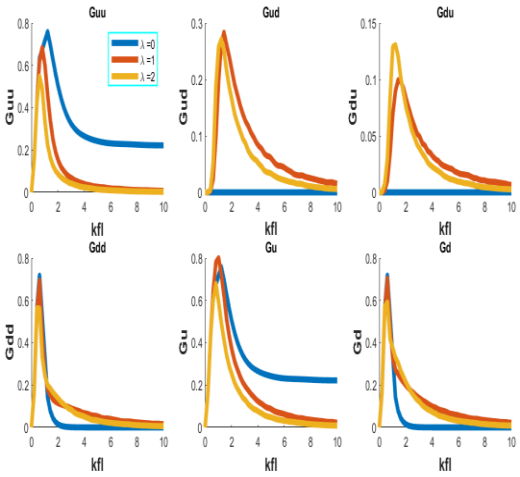


شکل ۵-مدهای مختلف رسانندگی الکتریکی $\frac{G}{G_0}$ را برحسب kfl برای مقادیر مختلف k0l نشان می‌دهد. در نمودارهای فوق $\mu_{N\,right} = -2$ ، $\mu_{N\,left} = -0.5$ ، $\mu_{WSM} = 0$ و $\lambda = 1$ فرض شده است.

نمودار شکل ۶ رسانش الکتریکی به صورت تابعی از kfl به ازای مقادیر مختلف λ ترسیم شده است. آنچه که از نمودارهای مربوطه واضح هست با افزایش قدرت اثر اسپین-اربیت G_{ud} و G_{du} مقادیر غیر صفر به خود می‌گیرند و نمودارمربوط به G_u در انرژی‌های فرمی کوچکتر (kfl) همگرا می‌شوند، حال آنکه G_d در kfl های بزرگتر همگرا می‌شوند.

همچنین آنچه که از مطالعات برمی‌آید علامت λ تاثیری در رفتار رسانش الکتریکی ندارد و فقط مقدار اندازه‌ی آن رفتار رسانش الکتریکی را تغییر می‌دهد.

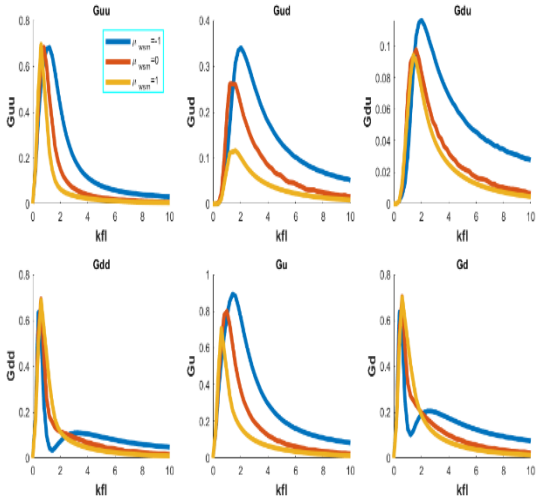
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل ۶-مدهای مختلف رسانندگی الکتریکی $\frac{G}{G_0}$ را برحسب kfl برای مقادیر مختلف λ نشان می‌دهد. در نمودارهای فوق $\mu_{N\,right}=-2$ ، $\mu_{N\,left}=-0.5$ ، $\mu_{WSM}=0$ و $kol=1$ فرض شده است.

رفت نمودارهای شکل ۷ رفتار مدهای گوناگون رسانش الکتیریکی را به صورت تابعی از kfl به ازای مقادیر مختلف μ_{WSM} نشان می‌دهد.آن‌چه از نمودار ها پیداست با افزایش پتانسیل الکتریکی ناحیه نیمه فلز وایل رسانش الکتریکی سریع تر به صفر همگرا می‌شود. همچنین به ازای مقادیر منفی پتانسیل شیمیایی ناحیه میانی در G_{dd} ما شاهد افزایش دوباره‌ی رسانش الکتریکی پس از صفر شدن آن و کاهش مجدد آن هستیم.

نتایج حاصـــل از این مقاله می‌تواند در طراحی ابزار آلات الکتریکی مفید باشد و مورد استفاده ی مهندسان قرار بگیرد.



شکل ۷ -مدهای مختلف رسانندگی الکتریکی $\frac{G}{G_0}$ را برحسب kfl برای مقادیر مختلف μ_{WSM} نشان می‌دهد. در نمودارهای فوق $\mu_{N\,right}=-2$ ، $\mu_{N\,left}=-0.5$ ، $\lambda=1$ و $kol=1$ فرض شده است.

مرجع‌ها

[1] K. Das and A. Agarwal, “Berry curvature induced thermopower in type-I and type-II Weyl semimetals”, Phys. Rev. B, 100, (2019), 1–15.

[۲]Khanna, Udit, Dibya Kanti Mukherjee, Arijit Kundu, and Sumathi Rao. 2016. “Chiral Nodes and Oscillations in the Josephson Current in Weyl Semimetals.” *Physical Review B* 93 (12): 1–9.

[۳] Alomar, M. I., and David Sánchez. 2014. “Thermoelectric Effects in Graphene with Local Spin-Orbit Interaction.” *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* 89 (11): 1–9.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی گذار فاز عایق- رسانا در ساختار چندلایه‌ای گرافن/هگزاگونال بورون نیترید

بهنیا ، سهراب[۱]؛ نعمتی ، فاطمه[۱]؛ جوانشور، الهه[۱]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی ارومیه ، انتهای خیابان بند ، ارومیه

چکیده

ساختارهای واندروالسی با پیوندهای کووالانسی قوی که ثبات درون صفحه‌ای بلورهای دو بعدی را فراهم می‌کنند، توجه محققان در طراحی نانو دستگاه‌ها را به خود جلب کرده‌اند، لذا ساختار مرکب از شبکه نیترید بور با گرافن مورد توجه قرار گرفته است. در این مقاله تاثیر عوامل خارجی از جمله ناخالصی‌های مختلف (فلوئور و نیتروژن)، تغییر ابعاد شبکه و میدان الکتریکی بر روی رسانایی ساختار گرافن-هگزاگونال بورون نیترید مورد بررسی قرار گرفته است. با استفاده از نظریه آشوب کوانتومی (نظریه ماتریس تصادفی) به بررسی گذار فاز عایق-رسانا پرداخته شد. برای هر شبکه، تعداد ۶۵ در ۹۰ اتم در نظر گرفته شد. میدان الکتریکی ۲.۵ ولت بر نانومتر به عنوان پارامتر بهینه انتخاب شد. ۲٪ ناخالصی فلورین برای شبکه گرافن و ۲٪ ناخالصی کربن در شبکه هگزاگونال بورون نیترید، به عنوان ناخالصی که بهترین احتمال گذار به فاز رسانا را ایجاد می‌کند، بدست آمد. مشخص شد که احتمال گذار به حالت رسانا با فاصله مابین صفحات رابطه عکس دارد.

واژه های کلیدی: *گرافن، هگزاگونال بورون نیترید، آشوب کوانتومی، نظریه ماتریس تصادفی، ناخالصی، میدان الکتریکی*

Investigation of insulation-conductive phase transition in graphene / hexagonal boron nitride multilayer structure

Sohrab Behnia[1], Fatemeh Nemati, Elahe Javanshoor

[1] *Department of Physics, Urmia University of Technology, Urmia*

Abstract

Van der waals structures with strong covalent bonds that provide in-plane stability of two-dimensional crystals have attracted the attention of researchers in the design of nano-materials, so the structure is composed of a boron nitride network with graphene has been considered. In this paper, the effect of external factors such as various impurities (fluorine and nitrogen), changes in grid dimensions, and the electric field on the conductivity of the graphene-hexagonal boron nitride structure have been investigated. Using quantum chaos theory (Random matrix theory), the insulation-conductive phase transition was investigated. For each network, ٦٥ by ٩٠ atoms were considered. An electric field of ٢.٥ volts per nanometer was selected as the optimal parameter. ٢٪ fluorine impurity for graphene lattice and ٢٪ carbon impurity for hexagonal boron nitride lattice were obtained as the impurities that have the best probability of transition to the conductive phase. It was found that the probability of transition to the conductive state is inversely related to the distance between the layers.

***Keywords**: Graphene, Hexagonal boron nitride, Quantum chaos, Random matrix theory, Impurity, Electrical field*

PACS No.

مقدمه

گرافن، یک لایه نازک اتمی از اتم‌های کربن است که در یک شبکه لانه زنبوری چیده شده‌اند، به دلیل فیزیک جالب و همچنین پتانسیل کاربردی آن، توجه محققان زیادی را به خود جلب کرده است. به طور خاص، تحرک بسیار بالا و کنترل آسان حامل‌های بار با اعمال ولتاژ گیت، گرافن را به یک کاندید مناسب برای استفاده در قطعات فتوالکترونیکی با خواصی فراتر از نیمه هادی‌های معمولی تبدیل کرده است [۱]. گرافن یک نیم رسانا است که گاف

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

انرژی آن صفر می‌باشد. برای اینکه بتوانیم از گرافن در صنعت الکترونیک بهره ببریم، نیاز است گاف انرژی را در نوار انرژی ایجاد کنیم، زیرا وجود این گاف انرژی برای کنترل خواص الکتریکی در قطعات الکترونیکی ضروری می‌باشد [۲]. با اضافه کردن ناخالصی، اعمال میدان الکتریکی، تنش تک محوری یا تغییر ساختار گرافن می‌توان گاف انرژی را در گرافن و هگزاگونال بورون نیترید ایجاد کرد [۳]. یکی از محبوب‌ترین مواد واندروالس، نیترید بور شش ضلعی (h-BN)[۱] با خواصی خارق‌العاده مانند سطح اتمی صاف، شکاف باند بزرگ (۴.۷۵eV) رسانش حرارتی بالا و پایداری حرارتی مطلوب است. هنگامی که h-BN با یک لایه نازک از مواد دیگر ترکیب می‌شود، خواص جالبی از خود نشان می‌دهد. بنابراین h-BN را می‌توان یک زیرلایهٔ مناسب برای گرافن جهت ایجاد گاف در گرافن (به دلیل کوچک بودن عدم تطابق شبکه‌ها (۱.۸٪)) در نظر گرفت [۴]. ما گذار فلز- عایق در G-hBNرا به عنوان ابزاری برای درک این مکانیسم مطالعه می‌کنیم. نظریه ماتریس تصادفی[۲] (RMT) به محدودیت پذیرفته شده در مطالعه مواد واندروالس پاسخ می‌دهد که نخستین بار در سال ۱۹۳۰ در شاخه آمار ریاضیات مطرح و بعدها در سال ۱۹۵۰ با ناتوانی بر روی محاسبه ترازهای انرژی در هسته توسط ویگنر توسعه داده شد [۵]. لذا توزیع طیفی سیستم‌های کوانتومی بی‌نظم سطوح انرژی، مبنایی را برای کاربرد RMT در چنین موادی فراهم می‌کند. تغییرات طیف انرژی با پارامتر دافعه β مشخص می‌شود. در این مطالعه، به منظور تشکیل شبکه G-hBN، از جبر بوز-مزنر [۶] استفاده می‌شود، این جبر بر اساس نمایش ماتریسی گراف‌ها ساخته شده است که به تفصیل در بخش مدل و روش‌ها بیان خواهد شد. ما از G-hBN به عنوان ساختار ناهمسان واندروالس برای تجزیه و تحلیل ترانزیستورهای تونل زنی متمرکز شده‌ایم. ما در این کار می‌خواهیم گذار را در ساختار ناهمسان G-hBN بر اساس رویکرد آشوب کوانتومی شناسایی کنیم. لذا در ادامه با بیان مدل و روش‌ها به بحث و نتیجه‌گیری پرداخته و در نهایت جمع-بندی می‌کنیم.

مدل و روش

هامیلتونین کل سیستم به فرم زیر در نظر گرفته می‌شود:

$$H = H_G + H_{hBN} + H_{G-hBN} \quad (۱)$$

که در آن H_G معرف هامیلتونین شبکه خالص گرافن، H_{hBN} معرف هامیلتونین شبکه هگزاگونال بورون نیترید و H_{G-hB} معرف هامیلتونین حاصل از برهمکنش گرافن و هگزاگونال بورون نیترید به صورت زیر می باشند [۷]:

$$H_G = \sum_{i1} \varepsilon_c \left(a_{i1}^{\dagger} a_{i1} + b_{i1}^{\dagger} b_{i1} \right) + \sum_{i1, j1} t(i_1, j_1)(a_{i1}^{\dagger} b_{j1}) + H.C. \quad (۲)$$

$$H_{hBN} = \sum_{i2} \left(\varepsilon_B a_{i2}^{\dagger} a_{i2} + b_{i2}^{\dagger} b_{i2} \right) + \sum_{i1, j1} t(i_2, j_2)(a_{i2}^{\dagger} b_{j2}) + H.C. \quad (۳)$$

$$H_{G-hBN} = -\sum^{d_1} eEy_{k_1} I_{N_1} \otimes J_{N_2} + \left[\sum_{k_2=0}^{d_2} (\varepsilon_B + \varepsilon_N) - eEy_{k_2} \right] I_{N_1} \otimes I_{N_2} + \sum_{k_1=1}^{d_1} t(k_1)(A_{k_1})_{N_1} \otimes J_{N_2} + I_{N_1} \otimes \left[\sum_{k_2=1}^{d_2} t(k_2)(A_{k_2}) N_2 - \sum_{k=2}^{d_2} t_2(k_2)(B_{k_2})_{N_1} \right] \quad (۴)$$

در این معادلات، $a^{\dagger}$,b, a ,$b^{\dagger}$ عملگرهای خلق و نابودی هستند. ε_C، ε_B ، ε_N، $t(i_1, j_1)$ و $t(i_2, j_2)$ به ترتیب انرژی آنسایت کربن[۳]، بور، نیترید و انرژی جهش بین کربن-کربن و بورون-نیترید می‌باشند، که در جدول۱، مقادیر مربوطه بیان می-شود.

جدول۱ : پارامترهای مورد استفاده در مدل [۸].

پارامتر	نام	مقدار (ev)
ε_c	انرژی جایگاهی کربن	۰
ε_B	انرژی جایگاهی بور	۳.۰۹
ε_N	انرژی جایگاهی نیترید	-۱.۹۸
t_{cc}	انرژی جهش کربن-کربن	-۲.۹۹
t_{BN}	انرژی جهش بورون-نیترید	-۳.۰۳

[۱] hexagonal Boron Nitride
[۲] Random Matrix Theory
[۳] On site energy

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

t_{CN}	انرژی جهش کربن-نیترید	-۲.۷۹
t_{CB}	انرژی جهش کربن-بورون	-۲.۶۸
a_1	فاصله بین دو اتم کربن	۰.۱۴۴nm
a_2	فاصله بین اتم بور و نیترید	۰.۲۵۶nm

توصیف نظریه ماتریس تصادفی، فضای فاخ و جبر بوز مزنر[۶]:

چون سیتم مد نظر، یک سیستم کوانتومی است و در سیستم‌های کوانتومی ترازهای انرژی یک سیستم با استفاده از ویژه مقادیر هامیلتونی سیستم، مشخص می‌شود. به منظورتشکیل شکل ماتریسی هامیلتونی، از نمایش فضای فاخ استفاده می‌شود و برای بدست آوردن عناصر ماتریس در فضای فاخ، هامیلتونی شبکه ما بین ویژه بردارهای متناظر با مختصات مکانی هر اتم در شبکه دو بعدی، ساندویچ می‌شود. در غیاب میدان الکتریکی و ناخالصی، عناصر قطری ماتریس در واقع انرژی جایگاهی اتم‌های کربن برای شبکه گرافن و برون و نیترید برای شبکه hBN و عناصرغیر قطری انرژی جهش بین اتم‌ها می‌باشد. به منظور توصیف نظریه مد نظر، به توصیف گراف خواهیم پرداخت. گراف شامل یک جفت $\Omega=(V,E)$ که V و E به ترتیب معرف مجموعه رئوس و یال‌ها می‌باشند. ماتریس مجاورت گراف به شرط اینکه اگر دو راس با یال به هم وصل شده باشند، تشکیل می‌شود. به عبارتی می‌توان بیان کرد که نظریه assosiation scheme که بیانگر ارتباط بین اعضای یک مجموعه است، توسط Bose و Nair مطرح شد[۶]. با تعریف association class به عنوان ارتباطی بر روی مجموعه رئوس، ارتباط بین ماتریس‌های مجاورت سیستم برای دسته‌های مختلف می‌شود، در مطالعه مذکور با استفاده از ضرب گراف، به خلق ماتریس مجاورت سیستم متشکل از G-hBN پرداخته شد.

با اعمال میدان الکتریکی با معادله زیر [۷] به بررسی خواص رسانایی شبکه پرداخته شد:

$$H_{field}=-\sum_{i=1}^{2} eEy_i(a_i^{\dagger}a_i+b_i^{\dagger}b_i) \qquad (۵)$$

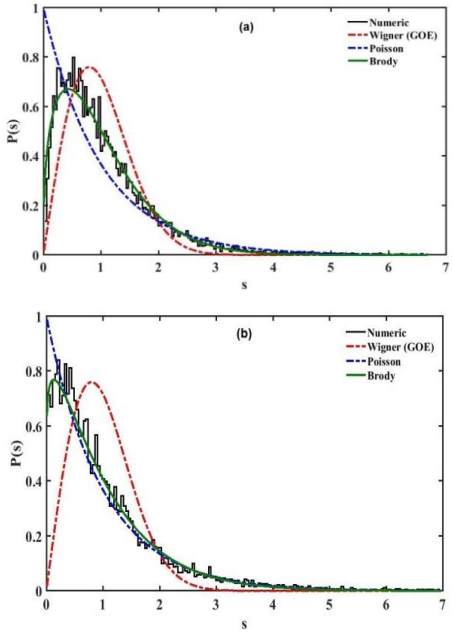
تاثیر میدان الکتریکی بر روی ماتریس فاخ، بر روی عناصر قطری خواهد بود. لذا بعد از محاسبه شکل ماتریسی هامیلتونی، با محاسبه ویژه مقادیر و ویژه بردارها می‌توان به بررسی طیف سطوح پرداخت.

بحث و نتیجه گیری:

با در نظر گرفتن ساختار G-hBN و استفاده از نظریه ضرب گراف، هامیلتونین سیستم در قالب ماتریس نوشته شد. سپس تاثیر میدان الکتریکی مورد مطالعه قرار گرفت و نهایتا به منظور بهبود خواص الکترونیکی، ناخالصی به سیستم اضافه شد که به تفصیل بیان می شود.

تاثیر میدان الکتریکی

برای بررسی تاثیر میدان الکتریکی، میدان عرضی به شبکه G-hBN اعمال شد که شاهد نتایج زیر هستیم:



شکل ۱ : اثر میدان‌های الکتریکی اعمال‌شده بر ناهم‌ساختارهای G-hBN $N_T(G/hBN)=65\times90$ الف : توزیع طیف انرژی، زمانی که میدان الکتریکی اعمال شده صفر(سیستم خالص) و $\beta=(0.38)$ ب : میدان الکتریکی $(\beta=0.12)$ و $\left(E=2.5\frac{v}{nm}\right)$

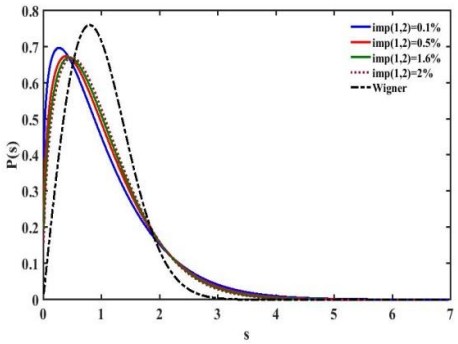
استفاده از میدان الکتریکی ابزارهای کنترل دینامیکی را برای شکستن تقارن طیف انرژی در نزدیکی نقاط دیراک فراهم کرد. اندازه شبکه را $N_T(G/hBN)=65\times90$ در نظر می‌گیریم. خطوط قرمز، آبی و سبز به ترتیب نشان دهنده توزیع ویگنری، پواسونی و برودی هستند. شکل۱(الف) نشان دهنده توزیع طیف

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

انرژی، زمانی است که شدت میدان الکتریکی اعمال شده صفر(سیستم خالص) است. در شکل۱(ب) مشاهده می‌کنیم که افزایش شدت میدان الکتریکی به میزان $\left(E=2.5\frac{v}{nm}\right)$ منجر به کاهش β به $(\beta=0.12)$ می‌شود. کاهش β نشان دهنده افزایش عرض باند و نشان دهنده تمایل به حالت عایق است.

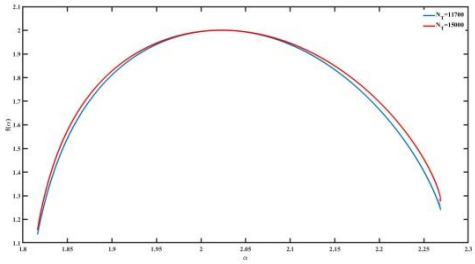
تاثیر میزان ناخالصی‌های مختلف:

یکی از موثرترین پارامترهای کنترل، اعمال ناخالصی است. ناخالصی‌های متفاوتی تاکنون برای مواد دو بعدی(گرافن و هگزاگونال بورون نیترید) مورد استفاده قرار گرفته است از جمله آن‌ها می‌توان به نیتروژن، بورون، کلسیم، فلوئور، سیلیکون، اشاره کرد. از بین ناخالصی‌های مختلفی که تاکنون برای شبکه نیترید بور-گرافن استفاده شده است، در این مقاله از فلوئور و نیتروژن برای شبکه گرافن و اتم‌های کربن برای شبکه نیترید بور در نظر گرفته شده است، که $(\varepsilon_F=-3.2\ ev)$ و $(t_{FC}=5.5ev)$ [۸] می‌باشد.



شکل۲ : تاثیر درصدهای مختلفی از ناخالصی فلوئورین بر روی ساختار G-hBN

همانطور که در شکل۲ نشان داده شده است، با مقایسه درصدهای مختلف فلورین در ساختار G-hBN متوجه شدیم که با افزایش ناخالصی تمایل سیستم به حالت ویگنری بیشتر می‌شود و در ناخالصی۲ درصد برای هر دو لایه، بتا به عدد ۰.۴۵ می‌رسد که بالاترین حد یافت شده است. لذا ناخالصی ۲ درصد برای محاسبات بعدی انتخاب شد. برای مشخص نمودن ویژگی‌های جاذب‌هایی که دارای ساختار چند فرکتالی هستند از تابع $f(\alpha)$ استفاده می‌شود که α نشان‌دهنده شاخص مقیاس می‌باشد و $f(\alpha)$ طیف مقیاس نیز نامیده می‌شود [۷]. در مکانیک کوانتومی معمولا در حالت گذار بین رفتارهای منظم و آشوبناک توابع موج ویژگی چند فرکتالی از خود نشان می‌دهند، این ویژگی ویژه در گذار اندرسون روی می‌دهد. هانطور که در شکل۳، نشان داده می‌شود، با افزایش ابعاد شبکه، سیستم تمایل به گذار به حالت عایق دارد.



شکل۳ : نمودار تابع طیف مقیاس $f(\alpha)$ بر حسب α به ازای t مختلف

به طورخلاصه، در این مقاله، با در نظر گرفتن شبکه متشکل از گرافن/هگزاگونال بورون نیترید، امکان گذار سیستم از حالت عایق به رسانا مشخص شد و در این راستا محدوده پارامترهای موثر(میزان میدان الکتریکی و درصد ناخالصی) با استفاده از نظریه آشوب کوانتومی مورد تحلیل قرار گرفت.

مرجع‌ها

[۱] A. K. Geim, and K. S. Novoselov, "*The rise of graphene. Nature Mater*" , (۲۰۰۷) ٦, ۱۸۳–۱۹۱.
[۲] 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.* ۸۱, (۲۰۰۹) ۱۰۹–۱٦۲.
[۳] F. Xia, D. B. Farmer, Y. M. Lin, and P. Avouris, "*Graphene field-effect transistors with high on/off current ratio and large transport band gap at room temperature*". *Nano letters* (۲۰۱۰) ۷۱۵-۷۱۸.
[٤] J. E. Vargas, B. Mortazavi, A.W. Cummings, R. Martinez-Gordillo, M. Pruneda, L. Colombo ia S. Roche. "*Electrical and thermal transport in coplanar polycrystalline graphene-hBN heterostructures*". arXiv preprint (۲۰۱۸) ۱۸۰٤.۰۹۲۷۲
[٥] E. P. Wigner, "*Characteristic vectors of bordered matrices with infinite dimensions i*". In The Collected Works of Eugene Paul Wigner (pp. ٥٢٤-٥٤٠). (۱۹۹۳).
[٦] O . Akhavan, M. Abdolahad, A. Esfandiar ia M. Mohatashamifar, "*Photodegradation of graphene oxide sheets by TiO ۲ nanoparticles after a photocatalytic reduction*". The Journal of Physical Chemistry C ۱۱٤(۳۰) (۲۰۱۰) ۱۲۹٥٥-۱۲۹٥۹.
[۷] X. Lin and J. Ni, "*Symmetry breaking in the double moiré superlattices of relaxed twisted bilayer graphene on hexagonal boron nitride*". Physical Review B, ۱۰۲(۳) (۲۰۲۰) ۰۳٥٤٤۱.
[۸] Z. Hou ia M.Yee, "*Electronic and transport properties of grapheme nanoribbons*". Conference on Nanotechnology (۲۰۰۷).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

رسانایی و ضریب سیبک اتصال فسفرینی شامل تک سد پتانسیل در راستاهای متفاوت

دوست خواه هروان، لیلا[۱]؛ عبداللهی پور، بابک[۲]

۱ گروه فیزیک ماده چگال، دانشکده علوم پایه دانشگاه شهید مدنی آذربایجان، تبریز

۲ گروه فیزیک ماده چگال، دانشکده فیزیک، دانشگاه تبریز، تبریز

چکیده

فسفرین، ماده‌ای دو بعدی است که دارای طیف انرژی ناهمسانگرد است. ما در این مقاله رسانایی یک اتصال فسفرینی شامل تک سد پتانسیل را برای راستاهای مختلف اتصال مورد بررسی قرار می‌دهیم. نتایج حاصل نشان می‌دهند که با افزایش زاویه‌ی اتصال نسبت به امتداد آرمچیر رسانایی اتصال کاهش می‌یابد. همچنین ضریب سیبک فسفرین در راستای آرمچیر در حالت‌های مختلف محاسبه می‌شود. نتایج بدست آمده نشان می‌دهند که ضریب سیبک در انرژی‌های پایین‌تر مقدار بیشتری دارد و همچنین با افزایش پهنای سد پتانسیل، ضریب سیبک افزایش پیدا می‌کند.

واژه های کلیدی: *فسفرین، رسانایی، رسانایی ترموالکتریکی، ضریب سیبک*

Conductance and Seebeck coefficient of a single potential barrier in phosphorene in different directions

Doustkhah Heravan, Leila [1]; Abdollahipour, Babak [2]

[1] Department of Physics, Shahid Madani Azarbaijan University, Tabriz
[2] Department of condensed matter physics, Faculty of Physics, University of Tabriz, Tabriz

Abstract

Phosphorene is a two-dimensional material that has an anisotropic energy spectrum. In this paper, we study the conductance of a single potential barrier in phosphorene in different directions of the junction. The obtained results show that the conductance decreases with increasing the angle of junction with respect to the armchair direction. Moreover, we calculate the Seebeck coefficient of the phosphorene in distinct states. The results show that the Seebeck coefficient has higher values at the low energies, and in adition Seebeck coefficient increases by increasing the width of the potential barrier.

***Keywords**: Phosphorene, Conductance, thermoelectric conductance, Seebeck coefficient*

PACS No. 68,72

مقدمه

فسفرین یک ماده دوبعدی و تک لایه از فسفر سیاه است که دارای طیف انرژی ناهمسانگرد است و همین امر موجب شده است اخیرا بسیار مورد توجه قرار گیرد. فسفر هرگز به عنوان یک عنصر آزاد در زمین یافت نمی‌شود چون بسیار واکنش‌پذیر است. فسفر سیاه، شکل پایدار فسفر در دما و فشار اتاق است و این به دلیل پیوندهای داخلی شش تایی میان اتم‌های آن است. هر اتم فسفر با سه اتم همسایه نزدیک خود تشکیل ساختاری شبیه به شبکه‌ای از لولاهای متصل به هم داده است[۱].

منشاء بسیاری از خواص فیزیکی و مکانیکی متفاوت فسفرین، تفاوت در نوع پیوندها در امتدادهای صندلی و زیگزاگ است. فسفرین در امتداد صندلی ساختار چروکیده‌ای دارد اما در امتداد زیگزاگ به صورت دو لایه ظاهر می‌شود.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

اخیرا مطالعه خواص ترموالکتریکی مواد و اتصالات مختلف به منظور تبدیل گرمای تلف شده به انرژی قابل استفاده و افزایش بازده مبدل‌های ترموالکتریکی اهمیت بسزایی یافته است. در این راستا مشخص شده است که ساختارهای نانو می‌توانند اثرات ترموالکتریکی قابل ملاحظه‌تری نسبت به مواد توده‌ای از خود نشان دهند[۲]. بر این اساس در این مطالعه خواص ترموالکتریکی یک اتصال نرمال- عایق- نرمال بر پایه فسفرین بازای پتانسیل‌ها متفاوت سد پتانسیل مورد بررسی قرار می‌گیرد.

معادلات اساسی

هامیلتونی دو نواری فسفرین در انرژی‌های کم به شکل زیر نوشته می‌شود[۳]:

$$H_0 = f_k I + g_{1k_x}\tau_x + g_{2k_x}\tau_y$$
$$g_{1k_x} = m + \alpha k_x^2 + \beta k_y^2 \,،\, g_{2k_x} = \gamma k_x$$
$$f_k = t_4\left(4 - 3k_x^2/2 - k_y^2/2\right) ،\, m = 0.76\ eV$$
$$\gamma = 2.29\ eV ،\, \alpha = -0.045\ eV ،\, \beta = 0.36\ eV \qquad (۱)$$

$\tau_{x,y}$ ماتریس‌های پائولی در پایه نوارهای انرژی هستند و I ماتریس واحد در این پایه است. با توجه به اینکه $\gamma \gg \alpha$ است در مرجع [۳] از اثرات کوچک α صرف نظر شده و به این ترتیب k های نواحی مختلف بصورت تحلیلی محاسبه شده‌اند، ولی ما در این تحقیق اثرات ضریب α را نیز اعمال می‌کنیم و k های نواحی مختلف را با حل عددی به دست می‌آوریم. در این تحقیق، رسانایی فسفرین در راستاهای مختلف نسبت به شبکه بلوری محاسبه می‌شود. برای پیدا کردن رسانایی در راستاهای مختلف، بردارهای موج در دستگاه مختصات دوران یافته باندازه زاویه θ را بر حسب بردارهای موج در راستای محورهای بلوری k_x و k_y به صورت زیر می‌توانیم بنویسیم:

$$\begin{pmatrix}\tilde{k}_x\\ \tilde{k}_y\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} cos\theta & sin\theta \\ -sin\theta & cos\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}k_x\\ k_y\end{pmatrix} \qquad (۲)$$

$\tilde{k}_x$ و $\tilde{k}_y$ بردارهای موج دوران یافته‌ی هستند. با جایگذاری بردارهای موج در دستگاه مختصات اولیه بر حسب بردارهای موج در دستگاه دوران یافته، هامیلتونی در دستگاه دوران یافته بدست می‌آید. هامیلتونی دوران یافته، ویژه مقادیر و ویژه توابع آن با روابط زیر داده می‌شوند.

$$\tilde{H}_0 = \tilde{f}_{\tilde{k}} I + \tilde{g}_{1\tilde{k}_x}\tau_x + \tilde{g}_{2\tilde{k}_x}\tau_y$$
$$\tilde{E}_{\tilde{k}_\pm} = \tilde{f}_k \pm \left[\left(m + \alpha\tilde{k}_x^2 + \beta\tilde{k}_y^2\right)^2 + \gamma^2\tilde{k}_x^2\right]^{1/2}$$
$$\tilde{\psi}_{\tilde{k}_\pm}(\tilde{k}) = \left(1, \tilde{\lambda}_0 e^{i\tilde{\varphi}_{\tilde{k}}}\right)/\sqrt{2} \ ،\ tan\,\tilde{\varphi}_{\tilde{k}} = \frac{\gamma\tilde{k}_x}{m+\alpha\tilde{k}_x^2+\beta\tilde{k}_y^2} \qquad (۳)$$

$\tilde{\lambda}_0 = sign(\tilde{E}_{\tilde{k}} - \tilde{f}_{\tilde{k}})$ و علامت مثبت برای نوار رسانش و علامت منفی برای نوار ظرفیت است.

برای بررسی ترابرد الکترونی در امتداد محور $\tilde{x}$ از میان یک سد پتانسیل ابتدا توابع موج مربوط به هر ناحیه از اتصال را با در نظر گرفتن انرژی الکترون فرودی به صورت $E = \mu + eV$ که μ پتانسیل شیمیایی و V ولتاژ بایاس اعمالی است بدست می‌آوریم. با اعمال پیوستگی توابع موج در مرزهای اتصال $\tilde{x} = 0\,, \tilde{x} = d$ به عنوان شرایط مرزی، $\tilde{\psi}_1|_{\tilde{x}=0} = \tilde{\psi}_2|_{\tilde{x}=0}$ و $\tilde{\psi}_2|_{\tilde{x}=d} = \tilde{\psi}_3|_{\tilde{x}=d}$ به ٤ معادله‌ی ٤ مجهولی می‌رسیم که با حل آن‌ها ضریب عبور در دستگاه دوران یافته $\tilde{t}$ بصورت زیر به دست می‌آید.

$$\tilde{t} = \frac{-4\tilde{\lambda}_0\tilde{\lambda}_0' \sin(\tilde{\varphi})\sin(\tilde{\varphi}')e^{i(\tilde{k}_2'-\tilde{k}_1)d}}{|\tilde{B}_1|^2 e^{2i\tilde{k}_2'd} - |\tilde{B}_2|^2} \qquad (٤)$$

که $\tilde{B}_1 = \tilde{\lambda}_0' e^{i\tilde{\varphi}'} - \tilde{\lambda}_0 e^{i\tilde{\varphi}}$ و $\tilde{B}_2 = \tilde{\lambda}_0 e^{i\tilde{\varphi}} - \tilde{\lambda}_0' e^{-i\tilde{\varphi}'}$ است. $\tilde{k}_1$ بردار موج دوران یافته در ناحیه‌ی نرمال و $\tilde{k}_2'$ بردار موج دوران یافته در ناحیه‌ی سد پتانسیل است.

رسانایی اتصال با مجموع احتمال عبور الکترون‌ها ($\tilde{T} = \tilde{t}\tilde{t}^\dagger$) در تمامی مدهای عرضی بصورت $\tilde{G} = G_0 \int \frac{d\tilde{k}_y}{2\pi}|\tilde{t}|^2$ داده می‌شود که G_0 حداکثر رسانایی اتصال است.

همچنین در این تحقیق ضریب سیبک فسفرین را در راستاهای مختلف محاسبه می‌کنیم. ابتدا ضریب رسانایی ترموالکتریک فسفرین دوران یافته را پیدا می‌کنیم و سپس با استفاده از بکارگیری آن در فرمول ضریب سیبک، ضریب سیبک فسفرین دوران یافته را محاسبه می‌کنیم که با این فرمول، محاسبه ضریب سیبک برای هر زاویه از اتصال امکان پذیر است. ضریب رسانایی ترموالکتریکی فسفرین با استفاده از تقریب زومرفلد از رابطه زیر قابل محاسبه است:

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$$\tilde{L} = L_0 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{\partial \tilde{k}}{\partial E}\tilde{T} + \tilde{k}\frac{\partial \tilde{T}}{\partial E}\right) cos\tilde{\varphi}\, d\tilde{\varphi} \qquad (۵)$$

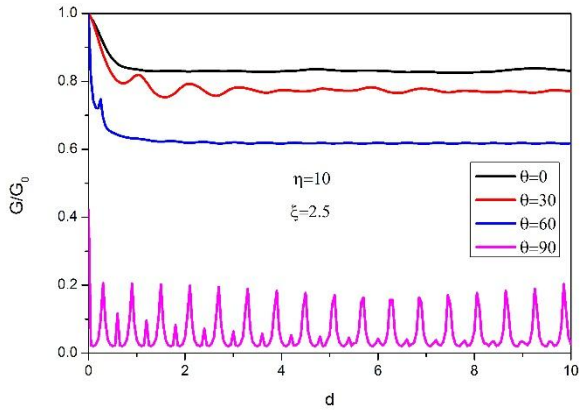
در اینجا $\tilde{\varphi}$ زاویه فرود الکترون در دستگاه دوران یافته و L_0 حداکثر مقدار ضریب رسانایی ترموالکتریک است. با پیدا کردن $\tilde{L}$ می‌توان با استفاده از فرمول زیر ضریب سیبک فسفرین را در راستاهای مختلف اتصال بدست آورد:

$$\tilde{S} = \frac{\pi^2 k_B}{3e}(k_B C)\frac{\tilde{L}}{\tilde{G}} \qquad (٦)$$

C همان دماست که آن را خیلی پایین در حد ۱۰ کلوین در نظر می‌گیریم تا بتوانیم از تقریب زومرفلد برای پیدا کردن ضریب رسانایی ترموالکتریک $(\tilde{L})$ و همچنین ضریب سیبک $(\tilde{S})$ فسفرین بهره ببریم. ضریب سیبک را بر حسب واحد $\frac{k_B}{e}$ بدست می‌آوریم.

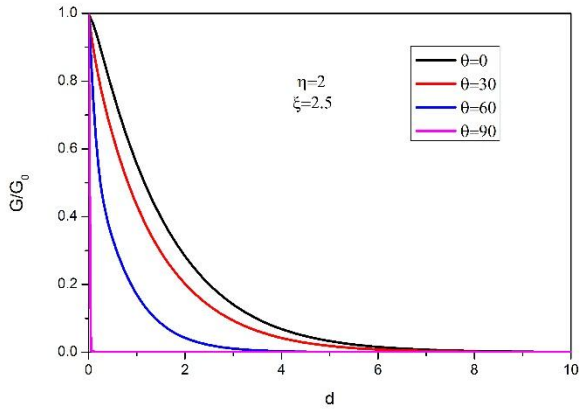
بررسی نتایج

در ادامه رسانایی فسفرین تک لایه شامل یک سد پتانسیل برای اتصال در راستاهای مختلف را بررسی می‌کنیم و همچنین ضریب سیبک فسفرین را بدست می آوریم. رسانایی بازای سه مقدار متفاوت انرژی سد پتانسیل که در بازه‌های انرژی $E + 2m < U$ ، $E \leq U$ و $U < E \leq E + 2m$ که به ترتیب نشان دهنده قرار گرفتن انرژی الکترون‌های فرودی در نوار ظرفیت، داخل گاف نواری و نوار رسانش در ناحیه سد پتانسیل در حالت نرمال هستند رسم شده است. در شکل (۱) رسانایی در نوار رسانش برای راستاهای مختلف اتصال با زوایای ۰ و ۳۰ و ٦۰ و ۹۰ درجه نسبت به جهت صندلی با انرژی $E/2m = 10$ به صورت تابعی از پهنای سد پتانسیل رسم شده است. مشاهده می‌شود که رسانایی در نوار رسانش بیشترین مقدار را دارد و با افزایش راستای اتصال از اندازه رسانایی کاسته شده و در زاویه 90 درجه رسانایی دارای پیک‌های کوچکی است و در کمترین مقدار خود نوسان می‌کند.



شکل۱: رسانایی فسفرین تک لایه با تک سد پتانسیل در نوار رسانش، بازای $E/2m = 10$ و $U/2m = 2.5$ ، بازای زاویه0 درجه(منحنی سیاه رنگ) ، زاویه30 درجه(منحنی قرمز رنگ) ، زاویه 60 (منحنی آبی رنگ) و زاویه 90 درجه(منحنی صورتی رنگ).

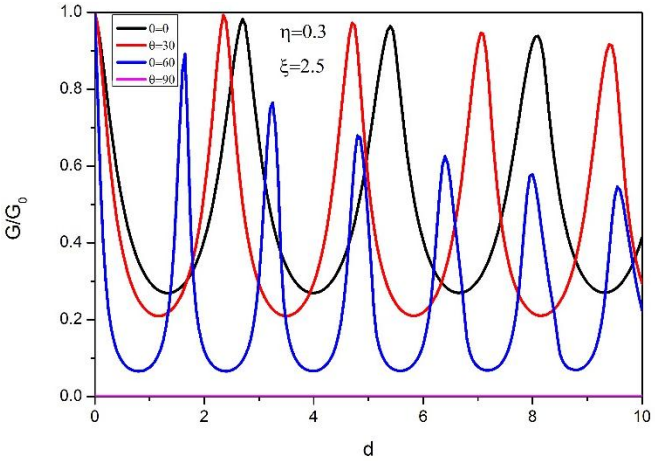
در شکل (۲) رسانایی برای داخل گاف بازای مقدار انرژی $E/2m = 2$ و مقدار انرژی سد پتانسیل $U/2m = 2.5$ بر حسب پهنای سد پتانسیل برای راستاهای مختلف اتصال رسم شده است. در داخل گاف رسانایی برای حد سد باریک بیشترین مقدار را دارد سپس با افزایش پهنای سد پتانسیل رسانایی به سرعت کاهش پیدا کرده و به مقدار صفر میل می‌کند. برای راستاهای اتصال با زاویه های بزرگتر روند کاهش رسانایی سریع‌تر اتفاق می‌افتد. بگونه‌ای که در زاویه‌های بالاتر اتصال، رسانایی تنها در حد سد باریک غیر صفر است و برای پهناهای بزرگتر سد پتانسیل رسانایی صفر می‌شود.



شکل۲: رسانایی فسفرین تک لایه با تک سد پتانسیل در گاف نواری، بازای $E/2m = 2$ و $U/2m = 2.5$ ، بازای زاویه 0 درجه(منحنی سیاه رنگ) ، زاویه30 درجه(منحنی قرمز رنگ) ، زاویه 60 درجه(منحنی آبی رنگ) و زاویه 90 درجه(منحنی صورتی رنگ).

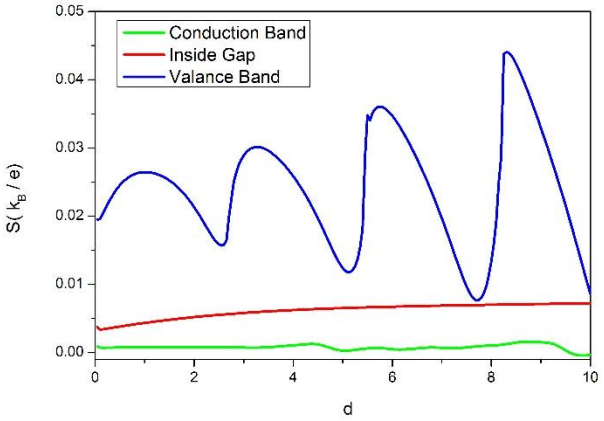
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

در شکل (۳) رسانایی برای نوار ظرفیت بازای مقدار انرژی $E/2m = 0.3$ و مقدار انرژی سد پتانسیل $U/2m = 2.5$ بر حسب پهنای سد پتانسیل برای راستاهای مختلف اتصال رسم شده است. مشاهده می‌شود در مقادیری از پهنای سد $(\tilde{d})$، رسانایی دارای پیک های تشدیدی است. با افزایش زاویه اتصال، تعداد این پیک های تشدیدی بیشتر و به هم نزدیک تر می شوند و از شدت رسانایی آن ها رفته رفته کاسته می‌شود. بگونه‌ای که در زاویه 90 درجه رسانایی صفر را شاهد خواهیم بود.



شکل۳: رسانایی فسفرین تک لایه با تک سد پتانسیل در نوار ظرفیت، بازای $E/2m = 0.3$ و $U/2m = 2.5$ ، بازای زاویه 0 درجه(منحنی سیاه رنگ) ، زاویه30 درجه(منحنی قرمز رنگ) ، زاویه 60 درجه(منحنی آبی رنگ) و زاویه 90 درجه(منحنی صورتی رنگ).

در شکل (٤) ضریب سیبک اتصال فسفرینی برای مقدار انرژی سد پتانسیل $U/2m = 2.5$ در سه ناحیه‌ی مختلف نوار رسانش با مقدار انرژی $E/2m = 10$ ، گاف نواری با مقدار انرژی $E/2m = 2$ و نوار ظرفیت با مقدار انرژی $E/2m = 0.3$ برای راستای صندلی، زاویه اتصال صفر، رسم شده است . با توجه به اینکه در محاسبات ضریب سیبک، پهنای سد پتانسیل $(\tilde{d})$ بصورت یک ضریب مثبت در یکی از جملات ظاهر می‌شود، از این رو ملاحظه می‌کنیم که با افزایش پهنای سد پتانسیل، ضریب سیبک نیز افزایش می‌یابد. این روند در هر سه حالت قابل مشاهده است. ضریب سیبک در نوار ظرفیت بصورت نوسانی است و اندازه پیک‌ها رفته رفته افزایش پیدا می‌کند و نسبت به حالت‌های دیگر اندازه آن بزرگتر است.



شکل٤: ضریب سیبک فسفرین برای حالت‌های متفاوت قرار گرفتن انرژی فرمی الکترون‌ها در ناحیه سد پتانسیل به ترتیب از بالا به پایید در نوار رسانش، گاف نواری و نوار ظرفت.

نتیجه گیری

نتیجه می‌گیریم که رسانایی سد پتانسیل فسفرینی در راستای صندلی از راستاهای دیگر بزرگتر بوده و با چرخش راستای اتصال به سمت راستای زیگزاگ رسانایی کاهش یافته و به کمترین مقدار خود می‌رسد. در مورد ضریب سیبک نیز می‌توان نتیجه گرفت که ضریب سیبک فسفرین با افزایش پهنای سد پتانسیل افزایش می‌یابد. در حالتی که انرژی فرمی در ناحیه سد پتانسیل در نوار ظرفیت قرار می‌گیرد ضریب سیبک بیشتر از سایر حالت‌ها است. پس می‌توان نتیجه گرفت در انرژی‌های کمتر، ضریب سیبک بیشترین مقدار خود را دارد.

مرجع‌ها

[1] A. Brown, S. Rundqvist, *"Refinement of the crystal structure of the black phosphorus", Acta. Cryst.* **19**, (1965) 684-685.
[2] D. Suszalski, G. Rut, and A. Rycerz *"Lifshitz transition and thermoelectric properties of bilayer graphene"*, Phys. Rev. B **97**, (2018) 125403.
[3] S. D. Sarkar, A. Agarwal and K. Sengupta , *"Anisotropic transport of normal metal-barrier-normal metal junctions in monolayer phosphorene", J. Phys.: Condens. Matter* **29**, (2017) 285601.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

محاسبه جرم و انرژی بستگی هگزاکوارک های سبک و سنگین

شیری ، نازنین[۱] ؛ منعم زاده، مجید[۲] ؛ تعظیمی، نرگس[۳]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه کاشان ، کاشان

[۲] دانشکده فیزیک دانشگاه کاشان، کاشان

[۲] دانشکده فیزیک دانشگاه کاشان، کاشان

چکیده

در این مقاله به مطالعه دقیق‌تر ساختارهای شش کوارکی پرداخته شده است. هگزاکوارک سبک d(2380) به عنوان کاندیدی برای ماده تاریک، یکی از ذرات مورد بررسی است. با حل معادله شرودینگر شعاعی برای پتانسیل هولتن به روش تکرار مجانبی، به محاسبه انرژی بستگی و جرم هگزاکوارک‌های سبک و سنگین پرداخته شده است. نتایج به‌دست آمده در توافق خوبی با نمونه‌های آزمایشگاهی و تئوری دیگر منابع است.*

واژه های کلیدی: *هگزاکوارک، انرژی بستگی، جرم، معادله شرودینگر، d*(2380)، روش تکرارمجانبی، پتانسیل هولتن*

Calculation of Mass and Binding Energy of Light and Heavy Hexaquarks

Shiry, Nazanin[1]; Monemzadeh, Majid[2]; Tazimi, Narges[3]

[1] Department of Physics, University of Kashan, Kashan
[2] Department of Physics, University of Kashan, Kashan
[3] Department of Physics, University of Kashan, Kashan

Abstract

In this paper, six-quark structures have been studied more precisely. d(2380), light hexaquark as a candidate for dark matter is one of the particles that investigated. Employing from analytical solution of the radial Schrodinger equation for Hulthen potential within the framework of the asymptotic iteration method, binding energy and mass of light and heavy hexaquarks are calculated. The extracted results have agreement with other works.*

***Keywords**: Hexaquark, Binding Energy, Mass, Schrodinger Equation, d*(2380), Asymptotic Iteration Method, Hulthen Potential*
PACS No. 10

مقدمه

بررسی هادرون‌های عجیب غریب به‌عنوان یک موضوع تازه و چالش‌برانگیز، که درک عمیق تری از رفتار غیراختلالی QCD به ما می‌دهد، در سال‌های اخیر بسیار مورد توجه قرار گرفته شده است[۱]. تمرکز بیشتر ما در این کار بر روی ذرات شش کوارکی خواهد بود. ساختارهای شش کوارکی، شامل هگزاکوارک‌های سبک و سنگین هستند که با توجه به کوارک‌های تشکیل دهنده، ویژگی‌های ساختاری آن‌ها از جمله جرم، پهنای واپاشی، روش‌های محاسبه تابع موج و ویژه‌مقدارها، با هم متفاوت می‌باشند.

در مطالعه هگزاکوارک‌های سبک، یکی از سبک‌ترین هگزاکوارک‌های شناخته شده، یک ساختار رزونانسی شش کوارکی است که d* می نامند با ایزواسپین I=0، اسپین J=3، پاریته مثبت، جرم M=2380(MeV) و پهنای‌واپاشی Γ=70(MeV)، که در پروسه‌های pn→d+π+π مشاهده شد[۲-۵]. ممکن است یک دیباریون یا یک حالت شش کوارکی باشد که اولین بار براساس تقارن SU(6) توسط دایسون و یانگ در سال ۱۹٦٤ پیشنهاد شد. تحقیق و بررسی بر روی سیستم شش کوارکی حدود ۵۰ سال پیش شروع شد، وقتی دایسون و یانگ ساختار ΔΔ را از یک دسته‌بندی

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

گروهی ساده بدون درنظر گرفتن اثرات دینامیکی پیشنهاد کردند[۶]. اُکا و یازاکی با بررسی برهمکنش تبادل تک گلوئون بین کوارک‌ها وجود چنین حالتی را پیشنهاد دادند[۷]. نویسندگان مختلفی جرم و پهنای واپاشی‌اش را محاسبه کردند[۸و۹] . جف حالت‌های شش کوارک‌هایی را در نظر گرفت که از کوارک‌های سبک بالا، پایین و شگفت که متعلق به گروه طعم suf(3) هستند، ساخته شده بودند[۱۰]. تاکنون ساختارهای متفاوتی برای d* پیشنهاد شده است. تاییدیه نهایی چنین رزونانسی توسط گروه WASA-at-COSY وقتی در حال بررسی اثر ABC در واکنش‌های pn→dππ و pn→dπ+π- بودند، گزارش شد[۱۱] .

در راستای مطالعه‌ی هگزاکوارک‌های سنگین، اخیرا جونارکار و ماتور[۱۲]اولین مطالعه‌ی QCD شبکه روی دیباریون‌های با کوارک های سنگین را گزارش دادند. آن‌ها ساختارهای دیباریون دوترون-گونه را با محتویات کوارک (uub)(ubb)، (ssb)(sbb)، (ssc)(scc)، (uuc)(ucc) و (ccb)(cbb) را ارزشیابی کردند[۱۳] برای نمونه آن‌ها انرژی bbbccc و آستانه‌ی آن را با استفاده از مدل سازنده استاندارد به‌دست آوردند. سپس نویسنده‌های دیگری نیز مولکول‌های هادرونی دیگری را که شامل یک نوکلئون و یک باریون با دو کوارک افسون بودند، را پیش‌بینی کردند[۱۴].

ذره H(uuddss)، حالت‌های NΩ و ΩΩ ممکن است برهمکنش قوی پایداری باشند. تا به امروز این سه کاندید جالب از دیباریون‌ها هنوز کاملا به وسیله آزمایش‌ها تایید نشده‌اند. به نظر می‌رسد که یکی باید به فراسوی این کاندیدها برود و برای کاندیدهای ممکن در یک ناحیه وسیع‌تری خصوصا سیستم با کوارک‌های سنگین، به لحاظ یک مدل قابل اطمینان‌تر به جست و جو بپردازد[۱۵].

از آنجا که در سال‌های اخیر هگزاکوارک سبک d* به دلیل ویژگی‌های منحصربه‌فردی که دارد به عنوان یکی از کاندیدای ماده تاریک مورد استقبال فراوانی قرار گرفته است، ارزش این تحقیق پیش‌رو را دوچندان می‌کند. اهمیت دیگری که این بررسی‌ها دارند به این دلیل است که تئوری دیگری وجود دارد مبنی بر اینکه ذرات عجیب غریبی مثل دیباریون‌ها می‌توانند ساختار داخلی یک ستاره نوترونی را تشکیل بدهند.

به دلیل اینکه بررسی‌های تئوری مربوطه حول این موضوع هنوز کم است، انگیزه‌ای برای ما ایجاد شد تا تحقیقات بیشتری روی این موضوع انجام دهیم. نتایجی که از این کار به دست خواهیم آورد، نگرش ژرف‌تری در مورد ویژگی‌های ساختاری ذرات شش‌کوارکی به ما می‌دهند.

نگاهی به روش تکرار مجانبی

در این پروژه در پی یافتن جواب‌های معادله شرودینگر برای رفتار شش کوارکی‌ها هستیم تا بتوانیم به بینشی عمیق‌تر در مورد جرم این ذرات و انرژی بستگی آن‌ها دست پیدا کنیم.

از طریق حل تحلیلی معادله شرودینگر شعاعی برای پتانسیل هولتن به روش تکرار مجانبی[۱۶]، جرم و انرژی بستگی ساختارهایی از قبیل دیباریون‌های $\Omega_{ccc}\Omega_{bbb}$ ، $\Sigma_c^0\Sigma_c^0$ ، $\Sigma_c^*\Sigma_c^*$ ، ΔΔ و NN به‌دست آورده شده است، در نهایت با مقایسه کار انجام شده نسبت به مراجع دیگر به صحت محاسبات انجام شده پی خواهیم برد.

روش تکرار مجانبی به طور خلاصه در اینجا بیان شده است، برای جزئیات بیشتر به منابع[۱۶و۱۷]مراجعه شود. هدف این روش حل معادله دیفرانسل مرتبه دوم است

$$y'' = \lambda_0(x)y' + s_0(x)y \qquad (1)$$

که $\lambda_0(x) \neq 0$ و متغیرهای $\lambda_0(x)$ و $s_0(x)$ دیفرانسیل پذیر هستند. معادله دیفرنسل (1) یک جواب کلی به صورت زیر دارد[۲۰]

$$y(x) = exp\left(-\int^x \alpha(x_1)dx_1\right)[c_2 + c_1 \times \int^x \exp\left(\int^{x_1}[\lambda_0(x_2) + 2\alpha(x_2)]dx_2\right)dx_1] \qquad (2)$$

برای مقدار k یی که به اندازه کافی بزرگ باشد و $k \geq 0$، اگر

$$\frac{s_k(x)}{\lambda_k(x)} = \frac{s_{k-1}(x)}{\lambda_{k-1}(x)} = \alpha(x), \quad k = 1,2,3,\ldots \qquad (3)$$

که

$$\lambda_k(x) = \lambda'_{k-1} + s_{k-1}(x) + \lambda_0(x)\lambda_{k-1}(x),$$

$$s_k(x) = s'_{k-1} + s_0(x)\lambda_{k-1}(x), \quad k=1,2,3,\ldots \qquad (4)$$

می‌توان رابطه بازگشتی را از k=0 شروع کرد با شرایط اولیه $\lambda_{-1} = 1$ و $s_{-1} = 0$ [۱۸] برای پتانسیلی مثل پتانسیل هولتن معادله شرودینگر شعاعی به شکل معادله(1) تبدیل می‌شود. سپس $s_0(x)$ و $\lambda_0(x)$ مشخص می‌شوند و پارامترهای $s_k(x)$ و $\lambda_k(x)$ با استفاده از رابطه بازگشتی در معادله (4) محاسبه می‌شوند.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

محاسبات

حرکت یک ذره با جرم M در پتانسیل متقارن کروی به وسیله‌ی معادله شرودینگر در مختصات کروی به صورت زیر توصیف می‌شود

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin\theta^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]+V(r)\right)\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=E\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi). \quad (5)$$

که

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

قسمت شعاعی معادله شرودینگر به‌دست آورده شده

$$\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)R_{nl}(r)+\frac{2M}{\hbar^2}\left[E-V(r)-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2}\right]R_{nl}(r)=0 \quad (6)$$

با اعمال تغییرمتغیر

$$R_{nl}(r)=\frac{U_{nl}(r)}{r}$$

و پتانسیل موثر

$$V_{eff}=V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2} \quad (7)$$

معادله شرودینگر شعاعی(6) تبدیل می شود به

$$\frac{d^2U_{nl}(r)}{dr^2}+\frac{2M}{\hbar^2}[E-V_{eff}]U_{nl}(r)=0 \quad (8)$$

پتانسیل هولتن[۱۹] چنین تعریف می‌شود

$$V_H(r)=-Ze^2\delta\frac{e^{-\delta r}}{1-e^{-\delta r}} \quad (9)$$

که Z عدد اتمی و δ پارامتر هم پوشانی(اسکرین) است. پتانسیل هولتن در نزدیکی($r\to0$) مثل پتانسیل کولمبی رفتار می‌کند، اما در نواحی مجانبی ($r >> 1$) به‌صورت نمایی کاهش پیدا می‌کند. پتانسیل کولمبی بخاطر ترم مرکزگریزش برای حالت $l\neq0$ به طور تحلیلی قابل حل نمی‌باشد به‌همین خاطر از یک تقریب استفاده می‌کنیم[۲۰] که برای ترم مرکزگریز تقریب

$$\frac{1}{r^2}=\delta^2\frac{e^{-\delta r}}{(1-e^{-\delta r})^2} \quad (10)$$

به‌کارگرفته شده سپس معادله شرودینگر شعاعی را برای پتانسیل موثر جدید حل کرده. برای کسب جزئیات بیشتر در خصوص محاسبات به منبع[۱۶]رجوع شود.

معادله ویژه مقداری به صورت زیر به‌دست خواهد آمد

$$E_{nl}=-\frac{\hbar^2}{2M}\left[\frac{MZe^2}{\hbar^2(n+l+1)}-\frac{(n+l+1)\delta}{2}\right]^2 \quad (11)$$

که در واحد اتمی $\hbar= e = 1$ و برای Z=1 معادله را حل می‌شود. مقدار M جرم کاهیده باریون ها محسوب می‌شود. برای اینکه دقت معادله (11) سنجیده شود به ازای n و l های مختلف و پارامتر هم‌پوشانی‌های متفاوت انرژی محاسبه می‌شود.

هگزاکوارک‌ها به‌صورت سیستم دوجسمی در نظر گرفته شده‌اند

$$M_{Hex.}=M_{baryon_1}+M_{baryon_2}+E_{nl} \quad (12)$$

با استفاده از جرم باریون ها و انرژی بستگی که برای آن‌ها در بالا به‌دست آمده، جرم کلی هگزاکوارک‌های ذکر شده را می‌توان محاسبه کرد.

نتیجه گیری

با مطالعه کامل و جامع روی انرژی بستگی و جرم هگزاکوارک‌های سبک و سنگین، از طریق روش تکرار مجانبی و با مقایسه نتایج حاصل از این پروژه با نمونه‌های آزمایشگاهی محتمل و روش‌هایی که دیگر فیزیکدانان برای این ذرات به‌کار بردند، علاوه بر پی بردن به ارزش و صحت محاسبات، به درک عمیق‌تری از ساختار محیط پیرامون و جهان خود می‌رسیم.همانطور که در جدول۱ دیده می‌شود، نتایج به‌دست آمده برای حالت پایه تطابق خوبی با نمونه های دیگر دارند. پتانسیل استفاده شده چون مستقل از اسپین هست، باعث اختلافات جزئی در نتایج حاصل، نسبت به مقادیر آزمایشگاهی برای دیباریون های سبک، شده است. در جدول۲ نتایج حاصل از حالات برانگیخته اول و دوم برای جرم و انرژی بستگی هگزاکوارک‌ها را مشاهده می‌کنیم که برای دیباریون های سنگین به دلیل عدم وجود داده های آزمایشگاهی برای آن‌ها به قطع نمی‌توان گفت که کدام یک از روش های محاسباتی دقت بالاتری نسبت به دیگری دارد.

پیشنهاد می‌شود که دیگر محققان در این حوزه با بهره‌گیری از روش های محاسباتی ذکر شده در منابع، به بررسی طیف وسیع تری ازدیباریون‌ها بپردازند.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

جدول۱:داده های جرم وانرژی حاصل ازمحاسبات به روش تکرارمجانبی(AIM) ومقایسه آن‌ها با داده‌های آزمایشگاهی موجود ودیگرمنابع بر حسب (MeV).

هگزاکوارک	انرژی بستگی (AIM)	جرم (AIM)	انرژی بستگی [۲۱]	جرم [۲۱]	جرم [۲۲]	جرم(exp) [۲۳و۲۴]	جرم [۲۵]
NN	-۳۲/۶	۱۸۲۰/۴	-	-	-	۱۸۷۵/۶	۱۸۷۶
$\Delta\Delta$	-۴۳/۷۱	۲۳۸۷	-	-	-	۲۳۸۰	۲۳۵۱
$\sum_c^0\sum_c^0$	-۵۱/۳	۴۷۵۴/۲	-۳۹/۵	۴۸۶۸	-	-	-
$\sum_c^0\sum_c^0$	-۶۶/۴	۴۸۷۹/۷	-۵۹/۶	۴۹۶۷	-	-	-
$\Omega_{ccc}\Omega_{bbb}$	-۲۳۲/۷	۱۸۷۴۴/۲	-	-	۱۹۰۸۲	-	-

جدول۲: داده های جرم و انرژی حاصل از محاسبات به روش تکرار مجانبی(AIM) برای اولین و دومین حالت برانگیخته بر حسب.(MeV)

هگزاکوارک	انرژی بستگی (اولین حالت برانگیخته)	جرم (اولین حالت برانگیخته)	انرژی بستگی (دومین حالت برانگیخته)	جرم (دومین حالت برانگیخته)
NN	-۲۶	۱۸۵۳	-۱۴/۶	۱۸۶۴/۳
$\Delta\Delta$	-۳۴/۲	۲۴۲۹/۸	-۱۹/۲	۲۴۴۴/۸
$\sum_c^0\sum_c^0$	-۶۸	۴۸۳۹/۵	-۳۸/۳	۴۸۶۹/۲
$\sum_c^0\sum_c^0$	-۶۹/۹	۴۹۶۷	-۳۹/۳	۴۹۹۷/۶
$\Omega_{ccc}\Omega_{bbb}$	-۱۹۹/۸۷	۱۸۹۹۴	-۱۱۲/۴	۱۹۰۸۱/۶

مرجع ها

[۱] Rui Chen, Fu-Lai Wang et al. , Exotic triple-charm deuteronlike hexaquarks, *Phys. Rev*. D **97** (2018) 114011.
[2] M. Bashkanov et al. Double-Pionic Fusion of Nuclear Systems and the "ABC" Effect: Approaching a Puzzle by Exclusive and Kinematically Complete Measurements. *Phys.Rev.Lett.* **102** (2009) 052301.
[۳] P. Adlarson et al. (WASA-at-COSY Collaboration.), *Phys. Rev. Lett*. **106** (2011) 242302.
[۴] P. Adlarson et al. (WASA-at-COSY Collaboration.), *Phys. Lett*. B **721** (2013) 229.
[۵] P. Adlarson et al. (WASA-at-COSY Collaboration.), *Phys. Rev. Lett*. **112** (2014) 202301.
[۶] F. Dyson and N. H. Xuong, *Phys. Rev. Lett*.**13** (1964) no. 26, 815.
[۷] M. Oka and K. Yazaki, *Phys. Lett. B* **90** (1980) 41.
[۸] F. Huang, Z. Y. Zhang, P. N. Shen and W. L. Wang, *Chin.Phys.C* **39** (2015) 071001.
[۹] H. Huang, J. Ping and F. Wang, *Phys. Rev. C* **89** (2014) 034001.
[۱۰] R. L. Jaffe, Perhaps a Stable Dihyperon, *Phys. Rev. Lett*. **38** (1977) 195 (1977); 38, 617(E) .
[۱۱] P. Adlarsonet et al., *Phys. Rev. Lett*.**106** (2011) 242302.
[۱۲] P. Junnarkar and N. Mathur, Deuteronlike Heavy Dibaryons from Lattice Quantum Chromodynamics, *Phys. Rev. Lett*. **123** (2019) 162003.
[۱۳] Jean-Marc Richard, Alfredo Valcarce, and Javier Vijande., Very Heavy Flavored Dibaryons, *Phys. Rev. Lett*, **124** (2020) 212001.
[۱۴] L. Meng, N. Li, and S. l. Zhu, Possible hadronic molecules composed of the doubly charmed baryon and nucleon, *arXiv*: (2018)1707.03598.
[۱۵] S.M. Gerasyuta and E.E. Matskevich, Dibaryons with two heavy quarks, *Int.J.Mod.Phys. E* 21(2012)1250058.
[۱۶] O Bayrak1, G Kocak and I Boztosun, Any l-state solutions of the Hulth´en potential by the
asymptotic iteration method, *J. Phys. A: Math. Gen*. **39** (2006) 11521–11529 .
[۱۷] C¸ iftc¸i H, Hall R L and Saad N , *J. Phys. A: Math. Gen.* **38** (2005)1147.
[۱۸] Fern´andez F M , *J. Phys. A: Math. Gen*. **37** (2004) 6173.
[۱۹] Hulth´en L , Ark. Mat. Astron. *Fys. A* **28** (2006) 5.
[۲۰] Ikhdair S M and Sever R , *Preprint quant-ph*/(2005) 0508009.
[۲۱] Xi-Zhe Ling, Ming-Zhu Liu , Li-Sheng Geng, Masses and strong decays of open charm hexaquark states**,** *Eur. Phys. J. C* **81**(2021) 1090.
[۲۲] Jean-Marc Richard ,Alfredo Valcarce, and Javier Vijande3, Very Heavy Flavored Dibaryons, *Phys.Rev.Lett*. 124(2020)21,21001.
[۲۳] P. Adlarson, et al., WASA-at-COSY, *Phys. Rev. Lett*. **112** (2014). 202301, arXiv :1402 .6844[nucl -ex].
[۲۴] P.A. Zyla, et al., *Particle Data Group*, PTEP , (2020) 083C01.
[۲۵] Hongxia Huang and Jialun Ping, Possible existence of a dibaryon candidate N_ (D21), *Phys.Rev.C* 98(2018)3,034001.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تأثیر میدان مغناطیسی پس زمینه بر اثر شوئینگر

لیلا شاه‌کرمی

دانشکده فیزیک دانشگاه دامغان، دامغان

l.shahkarami@du.ac.ir

چکیده

در این مقاله اثر شوئینگر را در حضور یک میدان مغناطیسی پس‌زمینه بررسی می‌کنیم. برای رسیدن به این هدف، یک مدل پایین به بالای هولوگرافیکی که یک حل معادلات اینشتین است را انتخاب می‌کنیم. با استفاده از دو روش متفاوت به این نتیجه می‌رسیم که زمانی که هر دو میدان در جهت یکسانی قرار دارند، میدان مغناطیسی اثر میدان الکتریکی بر تولید کوارک‌ها را افزایش می‌دهد.

واژه های کلیدی: اثر شوئینگر، هولوگرافی، مدل اینشتین–ماکسول–دیلتون

The effect of background magnetic field on the Schwinger effect

Shahkarami, leila

School of Physics, University of Damghan, Damghan, 41167-36716

Abstract

In this paper we investigate the Schwinger effect in the presence of a background magnetic field. To that purpose, we employ a bottom-up holographic model which is a solution of the Einstein equations. Using two different ways we found that the presence of the magnetic field enhances the effect of the electric field on the production of the quarks when both fields are at the same directions.

***Keywords**: Schwinger effect, Holography, Einstein-Maxwell-dilaton model*

PACS No.

مقدمه

در این مقاله قصد داریم اثر شوئینگر را در حضور یک میدان مغناطیسی پس زمینه‌ای مورد مطالعه قرار دهیم. پدیده شوئینگر که برای نخستین بار در نظریه الکترودینامیک کوانتومی QED مورد توجه قرار گرفت [1]، به تولید زوج ذره و ضد ذره‌ی باردار از خلأ در حضور میدان الکتریکی اشاره دارد. این پدیده تنها منحصر به QED نبوده و به عنوان مثال شامل تولید زوج کوارک و پادکوارک از خلأ کرومودینامیک کوانتومی QCD نیز می‌شود.

با توجه به ماهیت غیراختلالی این پدیده امکان بررسی همه جانبه‌ی آن توسط روش‌های اختلالی نظریه میدان وجو ندارد. در عوض استفاده از روش‌هایی همانند دوگانی پیمانه–گرانش می‌تواند در شناخت ما از این مسئله مهم، حداقل به صورت کیفی، بسیار مؤثر باشد [2].

تا کنون جنبه‌های بسیاری از این پدیده شگفت انگیز توسط دوگانی پیمانه–گرانش و به طور کلی هولوگرافی مورد مطالعه قرار گرفته و پاسخ‌های جالب توجهی نیز حاصل شده است. یکی از موضوعات مهم در این راستا بررسی اثر وجود همزمان میدان الکتریکی و مغناطیسی می‌باشد. از یک سو بررسی وجود همزمان

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی در موقعیت‌های مختلف فیزیکی اهمیت دارد که به عنوان نمونه می‌توان به پیدایش همزمان این دو درست پس از برخورد هسته‌های سنگین در برخورد دهنده هادرونی بزرگ اشاره کرد. از سوی دیگر پدیده شوئینگر یک اثر بسیار ضعیف است و این ویژگی، پیدا کردن آن را در آزمایشگاه‌ها بسیار دشوار می‌سازد. در نتیجه بررسی عواملی که می‌توانند باعث تشدید این اثر و واضح شدن آن شوند، بسیار کمک کننده است. در این راستا در مقاله حاضر تأثیر حضور میدان مغناطیسی پس زمینه‌ای را توسط یک مدل پایین به بالای[1] هولوگرافی که پاسخ معادلات حرکت است بررسی می‌نماییم [3].

گرانش اینشتین-ماکسول-دیلتون با میدان مغناطیسی

به منظور بررسی اثر میدان الکتریکی بر یک نظریه QCD با حضور میدان مغناطیسی، یک پس‌زمینه گرانشی با دو تا میدان ماکسول در نظر می‌گیریم که یکی از آنها دوگان پتانسیل شیمیایی μ است و دیگری دوگان یک جریان الکترومغناطیسی روی مرز می‌باشد. میدان پیمانه‌ای دوم برای معرفی میدان مغناطیسی در پس‌زمینه اضافه می‌شود. همچنین کنش گرانشی شامل یک میدان اسکالر ϕ با یک پتانسیل نیز هست. متریک آنساتز اقلیدسی در چارچوب ریسمان به صورت زیر انتخاب می‌شود:

$$g^{s}_{MN}dx^{M}dx^{N}=\frac{L^{2}S(z)}{z^{2}}\left[f(z)dt^{2}+\frac{dz^{2}}{f(z)}+dx_{1}^{2}+e^{B^{2}z^{2}}(dx_{2}^{2}+dx_{3}^{2})\right], \quad (۱)$$

که در آن L شعاع AdS، B میدان مغناطیسی در راستای x_1 و همچنین $S(z)=e^{2A_s(z)}$ که $A_s(z)=A(z)+\frac{\phi(z)}{\sqrt{6}}$. همانند مقاله [3] تابع $A(z)$ را به صورت $A(z)=-az^2$ انتخاب می‌کنیم. با جایگذاری متریک (۱) در معادلات حرکتی که از وردش کنش گرانش در اختیار داریم، حل کامل گرانش شامل توابع $\phi(z)$ و $f(z)$ بدست می‌آید که در مقاله [3] قابل مشاهده هستند.

از طریق مقایسه دمای گذار به فاز غیرمحبوس که از محاسبات شبکه QCD برای حالت بدون میدان مغناطیسی و پتانسیل شیمیایی به دست آمده است، می‌توان مقدار پارامتر موجود در مسئله را به صورت $a=0.15\ GeV^2$ تعیین کرد. همچنین قید حقیقی بودن مقادیر میدان اسکالر مقادیری که میدان مغناطیسی می‌تواند اختیار کند را به $B\leq 0.61\ GeV^2$ محدود می‌کند که خوشبختانه این قید محدود بودن پتانسیل دیلتون را نیز تأمین می‌کند.

در بخش‌های بعدی قصد داریم اثر میدان الکتریکی را بر این سیستم توسط دو روش مختلف بررسی و مقایسه کنیم؛ روش تحلیل پتانسیل و محاسبه نرخ تولید توسط حلقه ویلسون دایره‌ای.

پتانسیل کوارک-پادکوارک در حضور میدان الکتریکی

پتانسیل کل را می‌توان از طریق مجموع انرژی ناشی از برهم‌کنش زوج کوارکی با میدان الکتریکی خارجی و انرژی برهم‌کنش بین کوارک و پادکوارک به دست آورد. برای محاسبه انرژی برهم‌کنش کوارک-پادکوارک، حلقه ویلسون مستطیلی را محاسبه می‌کنیم که ضلع کوچک آن در امتداد خط واصل زوج کوارک و ضلع بزرگ آن در امتداد زمان است. از نظر هولوگرافی این محاسبه با وردش کنش نمبو-گوتوی ریسمانی معادل است که در توده از یک شامه D3 آویزان شده و دو انتهای آن در محل کوارک و پادکوارک واقع است. لازم به توجه است که در بررسی اثر شوئینگر، ریسمان را به جای آویزان کردن از مرز، از شامه D3 آویزان می‌کنیم که به معنی در نظر گرفتن جرم متناهی برای کوارک‌هاست. این شامه D3 در یک موقعیت از توده که آن را با مختصه شعاعی z_0 نشان می‌دهیم، قرار گرفته است.

در این مقاله فقط موردی که در آن میدان الکتریکی با میدان مغناطیسی پس‌زمینه هم جهت است را مورد بررسی قرار می‌دهیم، یعنی فرض می‌کنیم میدان الکتریکی در جهت x_1 اعمال شده است. پس از نوشتن کنش نمبو-گوتو در این حالت که در آن متریک القا شده بر ریسمان با انتخاب $t=\tau$ و $x_1=\sigma$ به دست می‌آید، فاصله جدایی بین کوارک و پادکوارک به صورت زیر حاصل می‌شود:

$$l=2\int_{z_0}^{z_c}dz\ \frac{\sqrt{f(z_c)S(z_c)z^2}}{f(z)S(z)z_c^2\sqrt{h(z)}}, \quad (۲)$$

[1] Bottom-up model

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

که در آن z_c پایین‌ترین نقطه ریسمان در توده است و همچنین $h(z) = 1 - \frac{f(z_c)S(z_c)^2 z^4}{f(z)S(z)^2 z_c^4}$. همچنین پتانسیل کل به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$V_t = 2T_f L^2 \int_{z_0}^{z_c} dz \, \frac{S(z)}{z^2\sqrt{h(z)}} - E\, l, \qquad (۳)$$

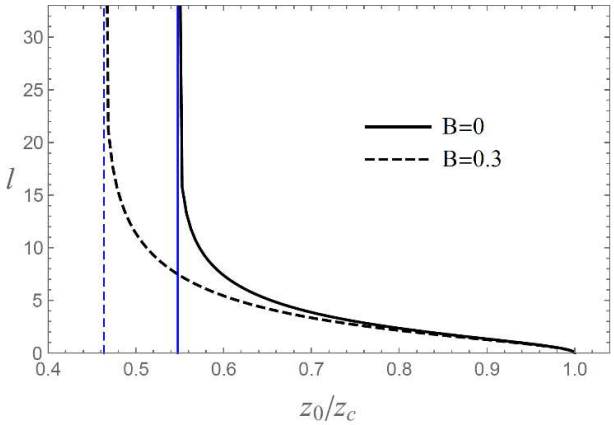
که در آن T_f تنش ریسمان است و جمله پایانی نشان دهنده‌ی پتانسیل برهم‌کنش با میدان الکتریکی خارجی است که به پتانسیل کوارک-پادکوارک اضافه شده است.

میدان‌های الکتریکی بحرانی برای این مسئله به صورت روابط زیر به دست می‌آیند:

$$E_c = T_f \frac{S(z_0)L^2}{z_0^2}\sqrt{f(z_0)}, \qquad (٤)$$

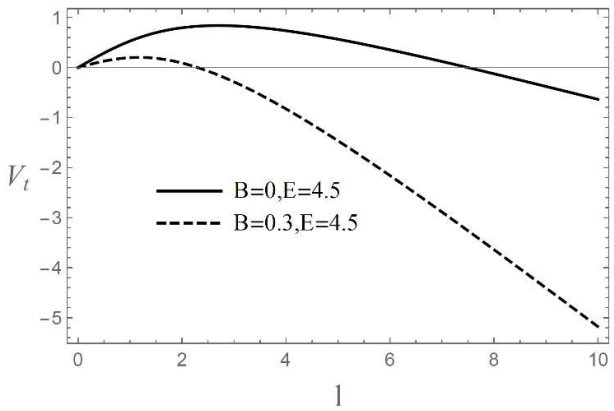
$$E_s = T_f \frac{S(z_w)L^2}{z_w^2}\sqrt{f(z_w)}, \qquad (٥)$$

که در آن E_s میدان الکتریکی کمینه‌ای است که پایین‌تر از آن اثر شوئینگر نمی‌تواند رخ دهد و E_c میدانی است که به ازای میدان‌های بزرگ‌تر از آن، خلأ واپاشی می‌کند. z_w بیشترین موقعیت شعاعی در دسترس در توده را مشخص می‌کند.



شکل۱: فاصله جدایی کوارک-پادکوارک در حضور و عدم حضور میدان مغناطیسی.

در کلیه نتایجی که در این مقاله ارائه شده است، فقط حالت $f(z) = 1$ مورد بررسی قرار گرفته است که انتظار می‌رود نشان-دهنده‌ی فاز محبوس در سمت نظریه پیمانه‌ای باشد. در این قسمت نتایج تحلیل پتانسیل را در نمودارهای ۱ و ۲ به عنوان نمونه مشاهده می‌کنیم. در شکل ۱ فاصله جدایی کوارک و پادکوارک بر حسب موقعیت انتهای ریسمان متناظر رسم شده است. در هر دو حالتِ حضور و عدم حضور میدان مغناطیسی، زمانی که انتهای ریسمان به دیوار IR (z_w) می‌رسد، فاصله کوارک و پادکوارک به بی‌نهایت میل می‌کند که این رفتار، نشان‌دهنده‌ی محبوس‌شدگی کوارک‌هاست. همان‌طور که در شکل ۲ مشاهده می‌شود وجود میدان مغناطیسی، ارتفاع و پهنای سد پتانسیل را کاهش می‌دهد که به معنای راحت‌تر شدن فرایند تولید زوج از خلأ می‌باشد.



شکل۲ : پتانسیل کل زوج کوارک در حضور میدان الکتریکی خارجی بر حسب فاصله جدایی کوارک و پادکوارک، در حضور و عدم حضور میدان مغناطیسی پس‌زمینه.

محاسبه نرخ تولید زوج

در این قسمت از طریق محاسبه حلقه ویلسون دایروی روی صفحه زمان و مختصه x_1 به بررسی تأثیر میدان الکتریکی روی نرخ تولید ذرات از خلأ می‌پردازیم. طبق تجویز هولوگرافی این کمیت معادل با مجموع کنش یک ریسمان که مرزهای ابرسطحِ آن بر یک دایره در متریک اقلیدسی است به علاوه کنش یک میدان ثابت در توده می‌باشد. برای این منظور، مختصات گرانش را به صورت زیر به مختصات قطبی-صفحه‌ای روی جهان سطح ریسمان (ρ, φ) ربط می‌دهیم:

$$t = \rho\cos(\varphi), x_1 = \rho\sin(\varphi), z = z(\rho). \qquad (٦)$$

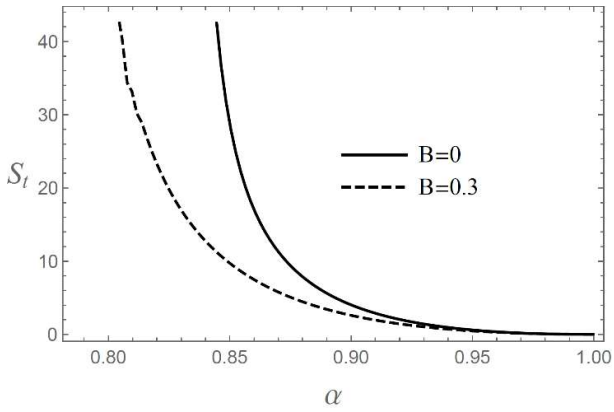
با جایگذاری این روابط در متریک توده، کنش‌های مورد نظر به صورت زیر به دست می‌آیند:

$$S_{NG} = 2\pi L^2 T_f \int_0^{\rho} d\rho\rho \frac{S(z(\rho))}{z(\rho)^2}\sqrt{1+z'^2}, \qquad (٧)$$

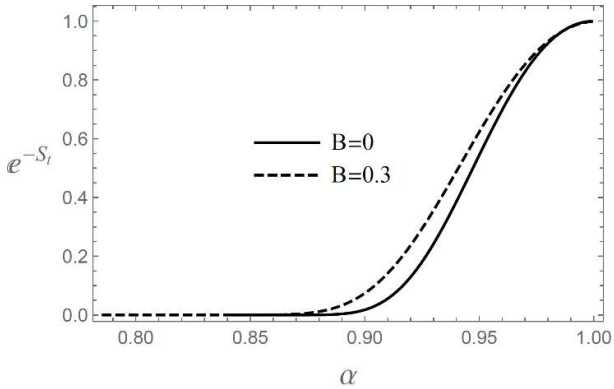
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$$S_{B^2} = -2\pi E T_f \int_0^{\rho} d\rho\rho. \quad (۸)$$

کنش کل، مجموع این دو کنش می‌باشد. با وردش کنش در رابطه (۷)، معادله حرکت به دست می‌آید که با اعمال شرایط مرزی مناسب بر روی پایین‌ترین نقطه ریسمان و همچنین محل برخورد ریسمان بر روی شامه D3، این معادله به روش عددی حل می‌شود.



شکل۳: کنش کلاسیکی بر حسب پارامتر α.



شکل٤: نرخ تولید زوج کوارک-پادکوارک بر حسب پارامتر α.

نمونه‌ای از حل‌های این معادله در شکل‌های ۳ و ٤ نشان داده شده است. محور افقی در این نمودارها α است که نسبت میدان الکتریکی به میدان الکتریکی بحرانی E_c را مشخص می‌کند. مشاهده می‌شود که وجود میدان مغناطیسی، کنش کل S_t را کاهش داده و در نتیجه نرخ تولید ذرات e^{-S_t} را افزایش می‌دهد و بنابراین نتایج این بخش در تطابق کامل با بخش قبلی قرار دارند. لازم به توجه است در هر دو روش فقط حالتی را مورد بررسی قرار دادیم که سیستم در حالت محبوس قرار دارد و در نتیجه برای سیستم، هر دو میدان الکتریکی بحرانی E_c و E_s وجود دارند.

نتیجه‌گیری

در این مقاله به مطالعه تأثیر میدان الکتریکی بر فاز محبوسِ یک مدل هولوگرافی شبه QCD پرداخته‌ایم. در این مدل، یک میدان مغناطیسی پس‌زمینه وجود دارد. با استفاده از دو روش متفاوت یعنی تحلیل پتانسیلِ کل در حضور میدان الکتریکی و محاسبه نرخ تولید زوج کوارک از طریق محاسبه حلقه ویلسون دایروی زمانی، تأثیر میدان مغناطیسی را بر تولید زوج از خلأ مورد مطالعه قرار داده‌ایم. از هر دو روش به این نتیجه رسیدیم که وجود میدان مغناطیسی که هم راستا با میدان الکتریکی است، باعث تقویت اثر شوئینگر می‌گردد. با توجه به شباهت جالب توجه این دسته از مدل‌های هولوگرافی (مدل‌های پایین به بالای هولوگرافی که پاسخ معادلات میدان در سمت گرانش هستند) به QCD، بررسی اثر شوئینگر در حالت عرضی با استفاده از روش‌های بیان شده در این مقاله، ارزش دنبال کردن دارد. همچنین می‌توان همانند مقاله [4]، فاکتور مقیاس متریک را تغییر داده و تأثیر آن را بر اثر شوئینگر در حضور میدان مغناطیسی پس‌زمینه مورد تحقیق قرار داد.

مرجع‌ها

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

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

[۳] H. Bohra, D. Dudal, A. Hajilou, and S. Mahapatra, "*Anisotropic string tensions and inversely magnetic catalyzed deconfinement from a dynamical AdS/QCD model*," *Phys. Lett. B* **801** (2020) 135184.

[٤] H. Bohra, D. Dudal, A. Hajilou, and S. Mahapatra, "*Chiral transition in the probe approximation from an Einstein-Maxwell-dilaton gravity model*," *Phys. Rev. D* **103** (2021) 086021.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

برهم کنش های چهار فرمیونی کوارک تاپ

خطیبی، سارا [1]؛ خانپور، حمزه [2]

دانشکده فیزیك، دانشگاه تهران، انتهاي خیابان کارگر شمالي ، تهران [1]
دانشکده فیزیك دانشگاه علم و فناوری مازندران، بهشهر [2]

چکیده

تولید سه کوارک تاپ در برخورد دهنده ی حلقوی نسل آینده (FCC – hh) برای بررسی برهم کنش های چهار - فرمیونی شامل سه کوارک تاپ مورد مطالعه قرار می گیرد. برای پیدا کردن حد بالای 95 % CL بر روی ضرایب ویلسون عملگرهای مربوطه ی چهار- فرمیونی از نظریه میدان های موثر برای مدل استاندارد (SMEFT) استفاده می شود. حالت نهایی یکتا با دو لپتون هم - علامت برای این آنالیز با جزییات در نظر گرفته می شود. همچنین یک زنجیره ی کامل شبیه سازی شامل در نظر گرفتن تمام فرآیندهای پس زمینه ی مرتبط و شبیه سازی واقعی آشکارساز در نظر گرفته می شود.

واژه های کلیدی: کوارک تاپ، نظریه میدان موثر، برهم کنش های چهار فرمیونی.

Four-Fermion Interactions of Top Quark

Khatibi, Sara[1]; Khanpour, Hamzeh[2]

[1] Department of Physics, University of Tehran,North Kargar Ave., Tehran
[2] Department of Physics, University of Science and Technology of Mazandaran, Behshahr

Abstract

We study the triple top quark production at the future hadron circular collider (FCC-hh) to probe the four-fermion interactions involving three top quarks. We employ the Standard Model Effective Field Theory (SMEFT) to find the upper limits at 95% CL on the Wilson coefficients of these kinds of four-fermion operators. We consider a detailed analysis with a unique signal signature of two same-sign leptons. A full simulation chain includes all the relevant backgrounds, and realistic detector simulations are taken into account.

***Keywords**: Top Quark, Effective Field Theory, Four-Fermion Interactions.*

PACS No. 12, 13.

مقدمه

مدل استاندارد ذرات بنیادی مدلی بسیار موفق در توصیف ذرات بنیادی و برهم کنش های بین آن ها است. اما برخی مشاهدات تجربی و مشکلات نظری، مانند وجود ماده تاریک در عالم ومسئله سلسله مراتبی، سبب می شود که مطمئن باشیم فیزیکی فراتر از مدل استاندارد در مقیاس های انرژی بالاتر وجود دارد. تمام اندازه گیری های انجام شده در برخورد دهنده ها، تا به حال تطابق خوبی با پیش بینی های مدل استاندارد ذرات بنیادی دارند و به نظر می رسد مقیاس فیزیک جدید خیلی بالاتر از مقیاس شکست تقارن خود به خودی الکتروضعیف باشد. در نتیجه، این دو مقیاس انرژی به اندازه ی کافی از همه فاصله دارند. پس اگر ذرات فیزیک جدید وجود داشته باشند، نمی تواند به صورت مستقیم در برخورد دهنده ها تولید شوند. با این حال، این درجات آزادی جدید می توانند جفت شدگی های ذرات مدل استاندارد را تحت تاثیر قرار دهند یا می توانند باعث ایجاد برهم کنش های جدید در بین ذرات مدل استاندارد شوند.

نظریه موثر میدان های کوانتومی برای مدل استاندارد (SMEFT) چهارچوب مناسب و مستقل از مدل برای

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مطالعه ی فیزیک جدید فراهم می کند، به خصوص هنگامی که مقیاس انرژی فیزیک جدید خیلی بالاتر از مقیاسی که در آزمایش در اختیار ما است، باشد. لاگرانژی SMEFT فقط شامل ذرات مدل استاندارد است و به تقارن های لورنتس و پیمانه ای مدل استاندارد احترام می گذرد. در این چارچوب، درجات آزادی جدید از مدل، به دلیل سنگینی، خارج می شوند و اثرات آن ها به صورت برهم کنش های جدید بین ذرات مدل استاندارد ظاهر می شوند. درواقع این برهم کنش های جدید به صورت عملگرهای با بعد بالاتر در لاگرانژی نمایش داده می شوند. از آن جا که این جملات با بعد بالاتر با عکس مقیاس انرژی جدید متناسب هستند، مهمترین سهم از جملات با بعدهای کم تر یعنی عمل گر های با بعد پنج و شش می آید. در بعد پنج تنها یک عمل گر وجود دارد که سبب جرم مایورنا برای نوترینو ها می شود. اما در بعد ۶ با در نظر گرفتن تقارن عدد باریونی و لپتونی ۵۹ عملگر وجود خواهد داشت. لاگرانژی موثر تا بعد شش به صورت زیر است :

$$\mathscr{L}_{\text{SMEFT}} = \mathscr{L}_{\text{SM}} + \sum_i \frac{C_i O_i}{\Lambda^2}, \quad (1)$$

در معادله ی بالا، جمله ی اول لاگرانژی مدل استاندارد است که فقط شامل عملگرهای با بعد چهار است. عملگرهای با بعد شش و ضرایب ویلسون متناظر با آن ها به ترتیب با O_i و C_i نشان داده شده اند. همچنین مقیاس فیزیک جدید با Λ نشان داده شده است.

در بین عملگرهای با بعد شش، عملگرهای چهار- فرمیونی می توانند درحد درختی در مدل های UV تولید شوند و درنتیجه ضرایب ویلسون بزرگ تری می توانند داشته باشند. با توجه به خواص ویژه کوارک تاپ، از جمله سنگین بودن نسبت به سایر ذرات، بررسی عملگرهای چهار-فرمیونی شامل کوارک تاپ بسیار اهمیت دارد. به خصوص عملگرهایی که شما سه کوارک تاپ و یک کوارک سبک باشند کمتر مورد توجه قرار گرفته اند. زیرا به ندرت مشاهده پذیر ها به این نوع عملگر ها حساس هستند.

در این مقاله می خواهیم به بررسی عملگرهای چهار - فرمیونی که شامل سه کوارک تاپ هستند در تولید سه کوارک تاپ در برخورد دهنده های هادرونی نسل آینده بپردازیم.

چارچوب نظری

در این بخش می خواهیم به معرفی عملگرهای با بعد شش چهار-فرمیونی که شامل سه کوارک تاپ هستند در چارچوب SMEFT بپردازیم. در میان برهمکنش های چهارفرمیونی، عملگرهای زیر دارای برهمکنش میان سه کوارک تاپ و یک کوارک سبک هستند [1,2]:

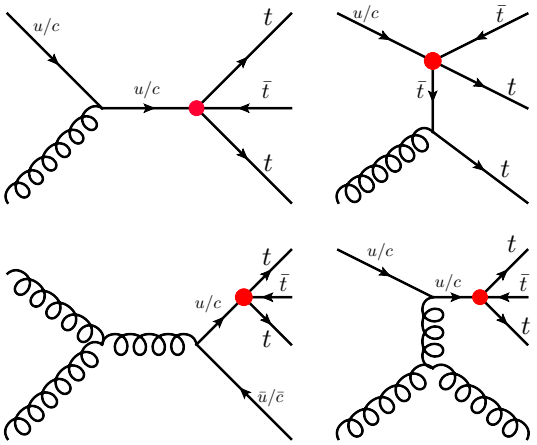
$$\begin{aligned}
O_{qq}^{1(ijkl)} &= \left(\bar{q}_i\gamma^\mu q_j\right)\left(\bar{q}_k\gamma_\mu q_l\right),\\
O_{qq}^{3(ijkl)} &= \left(\bar{q}_i\gamma^\mu \tau^I q_j\right)\left(\bar{q}_k\gamma_\mu \tau^I q_l\right),\\
O_{uu}^{(ijkl)} &= \left(\bar{u}_i\gamma^\mu u_j\right)\left(\bar{u}_k\gamma_\mu u_l\right),\\
O_{qu}^{1(ijkl)} &= \left(\bar{q}_i\gamma^\mu q_j\right)\left(\bar{u}_k\gamma_\mu u_l\right),\\
O_{qu}^{8(ijkl)} &= \left(\bar{q}_i\gamma^\mu T^A q_j\right)\left(\bar{u}_k\gamma_\mu T^A u_l\right), \quad (2)
\end{aligned}$$

که در عمگرهای بالا، q و u به ترتیب دوتایی کوارک چپ دست و تکتایی کوارک راست دست را نشان می دهند. ماتریس های پاولی با τ نشان داده شده است و $T = \lambda/2$ ماتریس های گلمان هستند.

با توجه به این عملگر ها می توان لاگرانژی موثر برای برهم کنش های بین سه کوارک تاپ و یک کوارک سبک (که در اینجا کوارک u درنظر می گیریم) را به صورت زیر نوشت:

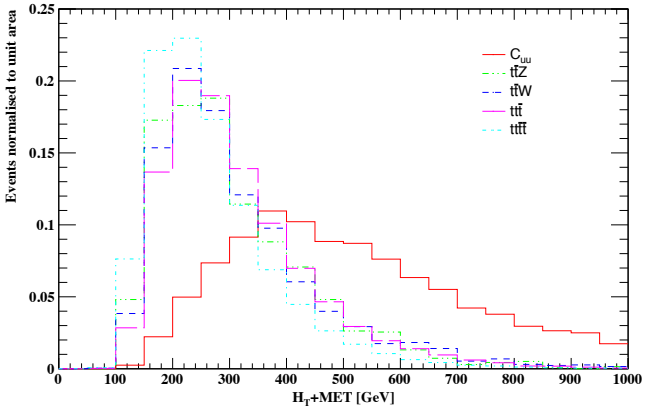
$$\begin{aligned}
\mathscr{L}_{\text{eff}} = \frac{1}{\Lambda^2}[&C_{qq_u}(\bar{t}_L\gamma^\mu t_L)(\bar{t}_L\gamma_\mu u_L) + C_{uu}(\bar{t}_R\gamma^\mu t_R)(\bar{t}_R\gamma_\mu u_R)\\
&+C_{qu_R}(\bar{t}_L\gamma^\mu t_L)(\bar{t}_R\gamma_\mu u_R) + C_{qu_L}(\bar{t}_R\gamma^\mu t_R)(\bar{t}_L\gamma_\mu u_L)]\\
&+h.c. \quad (3)
\end{aligned}$$

ما درادامه، لاگرانژی موثر بالا را، برای مطالعه ی سه کوارک تاپ در برخورد دهنده های هادرونی نسل آینده، مورد مطالعه قرار می دهیم.



شکل۱: نمونه ای از نمودارهای فاینمن تولید سه کوارک تاپ و سه کوارک تاپ همراه با یک جت اضافه در برخورد دهنده های هادرونی.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل۲: نمودار $H_T + \text{MET}$ برای فرآیند تولید سه کوارک تاپ و فرآیندهای پس زمینه در انرژی مرکز جرم ۱۰۰ TeV.

چارچوب شبیه سازی

در این بخش می خواهیم به معرفی فرآیند سیگنال و فرآیندهای پس زمینه بپردازیم. همان طور که قبلا گفته شد، ما علاقه مند به مطالعه تولید سه کوارک تاپ در برخورد دهنده های هادرونی نسل آینده هستیم تا بتوانیم برهمکنش های چهار-فرمیونی کوارک تاپ را بررسی کنیم. لازم به ذکر است که علاوه بر فرآیند تولید سه کوارک تاپ، ما فرآیند تولید سه کوارک تاپ همراه با یک جت سبک را هم در نظر گرفتیم. تعدادی از نمودارهای فاینمن این فرآیند سیگنال، برای نمونه، در شکل ۱ آمده است.
ما به فرآیندهای سیگنالی علاقه مند هستیم که دو کوارک تاپ هم-علامت هر دو به صورت لپتونی واپاشی کنند و کوارک تاپ دیگر به صورت هادرونی واپاشی کند. در نتیجه حالت نهایی ما شامل دو لپتون هم-علامت (الکترون یا میوئون) و سه جت-b و سه جت سبک خواهد بود. همچنین انرژی گمشده به دلیل حضور نوترینو ها در حالت نهایی وجود خواهد داشت. با توجه به فرآیند سیگنال، مهم ترین فرآیندهای پس زمینه $t\bar{t}Z,\ t\bar{t}W^{\pm},\ W^{+}W^{-}Z, t\bar{t}t\bar{t}$ و تولید سه کوارک تاپ همراه با جت در چارچوب مدل استاندارد هستند.
ابتدا لاگرانژی معادله ی (۳) را در نرم افزار Feynrules قرار گرفته است [3] . برای تولید رویداد فرآیندهای سیگنال و پس زمینه از نرم افزار MadGraph استفاده شده است [4]. همچنین برای شبیه سازی آبشار ذرات و آشکارساز به ترتیب از نرم افزار های Pythia و Delephes استفاده شده است [6,5]. رویداد ها در انرژی مرکز جرم ۱۰۰ TeV برای برخورد دهنده ی $FCC-hh$ تولید شده اند. برای تولید داده ها از تابع توزیع پارتونی NNPDF بهره برده شده است [7]. برای جدا کردن فرآیندهای سیگنال و پس زمینه برش های اولیه روی رویداد ها به صورت زیر اعمال شده است:

$\text{Cut1} \rightarrow n^{\ell} = 2\ell^{\pm\pm}, |\eta^{\ell}| < 2.5,\ p_T^{\ell} > 10\ \text{GeV},\ M_{\ell^{\pm}\ell^{\pm}} > 10\ \text{GeV}.$
$\text{Cut2} \rightarrow E_T^{miss} > 30\ \text{GeV}.$
$\text{Cut3} \rightarrow n^{\text{jets}} \geq 5\ \text{jets}, |\eta^{\text{jets}}| < 2.5, p_T^{\text{jets}} > 20\ \text{GeV}, \Delta R(\ell, j_i) \geq 0.4, \Delta R(j_i, j_j) \geq 0.4.$
$\text{Cut4} \rightarrow n^{\text{b-jets}} \geq 3\ \text{b}-\text{jets}.$

همچنین برای جدای بیشتر رویدادهای سیگنال ازرویدادهای پس زمینه، به توزیع های جنبشی مختلف رویدادهای سیگنال و پس زمینه نگاه کردیم، که یک نمونه از آن ها در شکل ۲ آمده است. با توجه به شکل توزیع برای سیگنال و پس زمینه ها، برش ثانویه زیر را انتخاب کردیم.

$$\text{Cut5} \rightarrow H_T + E_T^{\text{miss}} \geq 340\ \text{GeV}.$$

نتایج عددی

در این بخش می خواهیم پتانسیل برخورد دهنده ی $FCC-hh$ را برای بررسی برهم کنش های چهار- فرمیونی کوارک تاپ بررسی کنیم. در واقع ما می خواهیم حد بالا بر روی ضرایب ویلسون عملگر های چهار - فرمیونی که شامل سه کوارک تاپ هستند را با استفاده از تولید سه کوارک تاپ در برخورد دهنده ی $FCC-hh$ را پیدا کنیم.
برای تخمین زدن حد بالا بر روی ضرایب ویلسون از رهیافت بیزین استفاده می کنیم. فرض میکنیم که احتمال تعداد مشاهده شده رویدادها توزیع پواسونی داشته باشد:

$$L\left(n_{\text{obs}}, n_S, n_B\right) = \frac{\left(n_S + n_B\right)^{n_{\text{obs}}}}{n_{\text{obs}}!} e^{-\left(n_S + n_B\right)}, \quad (4)$$

که دراین معادله n_s و n_B به ترتیب تعداد رویدادهای سیگنال و پس زمینه هستند. آنگاه حد بالای 95 % CL بر روی تعداد رویدادهای سیگنال از رابطه ی زیر بدست می آید:

$$\frac{95}{100} = \frac{\int_0^{n_{\text{limit}}} L\left(n_{\text{obs}}, n_S, n_B\right) dn_S}{\int_0^{\infty} L\left(n_{\text{obs}}, n_S, n_B\right) dn_S}. \quad (5)$$

حدهای بالای 95 % CL برروی ضرایب ویلسون عملگرهای چهار- فرمیونی که شامل سه کوارک تاپ و یک کوارک سبک هستند در برخورد دهنده ی $FCC-hh$ با انرژی مرکز جرم ۱۰۰ TeV و درخشندگی کل ۳۰ ab^{-1} در جدول ۱ آمده است. در این جدول نتایج برای $\Lambda = 1\ \text{TeV}$ داده شده است. نکته ی قابل توجه این است که در هر بار یکی از ضرایب در زمان تولید رویداد ها روشن بوده است.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

جدول1 : حد بالای 95 % CL بر روی ضرایب ویلسون عملگرهای چهار- فرمیونی کوارک تاپ با $\Lambda = 1$ TeV در انرژی مرکز جرم ۱۰۰ TeV در برخورد دهنده ی $FCC - hh$ با درخشندگی کل ۳۰ ab^{-1}.

Wilson coefficient	$FCC - hh$ 30 ab^{-1}
C_{qq_u}	[−0.018,0.0017]
C_{uu}	[−0.055,0.0007]
C_{qu_R}	[−0.003,0.013]
C_{qu_L}	[−0.002, 0.011]

نتیجه گیری

در این مقاله با استفاده از تولید سه کوارک تاپ در برخورد های پر انرژی پروتون- پرتون در برخورد دهنده ی نسل آینده $FCC - hh$ به بررسی برهم کنش های چهار - فرمیونی که شامل سه کوارک تاپ است پرداختیم. برای این امر از رهیافت مستقل ازمدل SMEFT بهره بردیم. یک آنالیز کامل برای فرآیند سیگنال و فرآیندهای پس زمینه ی مربوطه انجام دادیم و در نهایت حد بالا با 95 % CL بر روی ضرایب ویلسون عملگرهای چهار - فرمیونی کوارک تاپ قرار دادیم، که خلاصه این حد ها در جدول ۱ آمده است. جزییات بیشتر همراه با در نظر گرفتن ظرایب ویلسون بیشتر در مرجع [8] شرح داده شده است.

مرجع‌ها

[1] B. Grzadkowski, M. Iskrzynski, M. Misiak, J. Rosiek, Dimension-six terms in the standard model Lagrangian, J. High Energy Phys. 10 (2010) 085, arXiv :1008 .4884.

[2] J. Aguilar-Saavedra, Effective four-fermion operators in top physics: a roadmap, Nucl. Phys. B 843 (2011) 638–672, arXiv : 1008 .3562, Erratum: Nucl. Phys. B 851 (2011) 443–444.

[3] A. Alloul, N.D. Christensen, C. Degrande, C. Duhr, B. Fuks, FeynRules 2.0 -a complete toolbox for tree-level phenomenology, Comput. Phys. Commun. 185 (2014) 2250–.2300, arXiv :1310 .1921

[4] J. Alwall, R. Frederix, S. Frixione, V. Hirschi, F. Maltoni, O. Mattelaer, H.S. Shao, T. Stelzer, P. Torrielli, M. Zaro, The automated computation of tree-level and next-to-leading order differential cross sections, and their matching to parton shower simulations, J. High Energy Phys. 07 (2014) 079, arXiv :1405 . 0301

[5] P. Skands, S. Carrazza, J. Rojo, Tuning PYTHIA 8.1: the Monash 2013 tune, Eur. Phys. J. C 74(8) (2014) 3024, arXiv : .1404 .5630

[6] DELPHES 3 Collaboration, J. de Favereau, C. Delaere, P. Demin, A. Giammanco, V. Lemaitre, A. Mertens, M. Selvaggi, DELPHES 3, a modular framework for fast simulation of a generic collider experiment, J. High Energy Phys. 02 (2014) .057, arXiv :1307 .6346

[7] NNPDF Collaboration, R.D. Ball, et al., Parton distributions from high-precision collider data, Eur. Phys. J. C 77(10) (2017) 663, arXiv :1706 .00428.

[8] S. Khatibi and H. Khanpour, Probing four-fermion operators in the triple top production at future hadron colliders,"Nucl. Phys. B 967, 115432 (2021) doi:10.1016/j.nuclphysb.2021.115432, arXiv:2011.15060 .

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

طراحی مفهومی سامانه تشخیصی ایکس نرم مورد استفاده در توکامک دماوند

معظمی قمصری، مهسا[1] ؛ شاکری، فاطمه[1]؛ پورشهاب، بنفشه[2]

[1] دانشکده فیزیک، دانشگاه کاشان، بلوار قطب راوندی، کاشان

[2] پژوهشکده فیزیک پلاسما و گداخت هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای سازمان انرژی اتمی ایران، انتهای خیابان کارگر شمالی، تهران

چکیده

مطالعه تابش‌های ایکس نرم ساطع شده از پلاسما در طول تخلیه توکامک، اطلاعات ارزشمندی از پدیده‌های مگنتوهیدرودینامیک، موقعیت و شکل پلاسما، نوسانات دندان اره‌ای و غیره ارائه می‌دهد. توموگرافی این تابش‌ها یک ابزار تشخیصی قدرتمند است که با اندازه‌گیری تابش‌های انتگرال گیری‌شده خطی، قادر به بازیابی پروفایل انتشار دو بعدی تابش‌های پلاسما می‌باشد. الزامات مد نظر در فاز طراحی سامانه‌ها شامل مقاومت در برابر تشعشع و خوردگی، حساسیت بالا و عدم ورود ناخالصی می‌باشد. در طرح‌های پیشنهادی سامانه‌های ایکس نرم توکامک دماوند قدرت تفکیک ۲ سانتی‌متر را در مرکز محفظه ایجاد می‌کنند. بدلیل حد پایین انرژی پرتو ایکس نرم توکامک دماوند ضخامت فیلتر برلیوم ۷ میکرومتر پیشنهاد شده‌است. آشکارسازهای بکاررفته در سامانه ایکس نرم، فوتودیود از نوع AXUV-16EL بوده که دارای ۱۶ آرایه خطی است. برای هدف بازسازی تصویر، شبیه‌سازی خطوط دید سامانه‌ها در آرایش‌ها و موقعیت‌های مختلف از محفظه خلاء انجام و آزمون پوشش هر آرایش محاسبه شد. دو آرایش پیشنهادی مطلوب، پوشش‌های ۳۹٪ و ۴۱٪ از محفظه را ایجاد کرده‌اند.

واژه‌های کلیدی: *تابش ایکس نرم، توکامک دماوند، سامانه تشخیصی پلاسما، آزمون پوشش*

Conceptual design of Soft-X ray diagnostic system using in Damavand Tokamak

Moazzemi Ghamsari, Mahsa[1]; Shakeri, Fateme[1]; Pourshahab, Banafsheh[2]

[1] *Department of Physics, University of Kashan, Kashan,*
[2] *School of Plasma Physics and Nuclear Fusion, Institute of Nuclear Science and Technology of Atomic Energy Organization of Iran (AEOI), North Kargar Street, Tehran*

Abstract

Study of soft X-rays emitted from plasma during tokamak discharge provides valuable information on magneto hydrodynamic (MHD) activities, plasma position and shape, sawtooth oscillation, and so on. Tomography is a powerful tool to reconstruct the two-dimensional emission profile of plasma radiations by measuring line integrated radiation. In the design phase, requirements of the diagnostic include high resistance to radiation, high sensitivity, the absence of impurities. Spatial resolution of proposed design is 2 cm in the center of chamber. Because of the low soft X-ray radiation energy of Damavand tokamak, thickness of beryllium filter is 7μm. The detectors used in the soft X-ray systems are AXUV-16EL photodiodes with 16 linear arrays. For the purpose of image reconstruction, the line of sight in different arrangements and positions of the vacuum vessel was simulated and the coverage maps were calculated. The two proposed optimal arrangements create 39% and 41% coverage of the plasma.

***Keywords**: Soft X-ray, Damavand Tokamak, Plasma diagnostic system, Coverage test*

مقدمه

پلاسمای توکامک، تابش‌های الکترومغناطیسی از انرژی‌های پایین تا انرژی تقریبا برابر با دمای پلاسما را به دلیل انواع فرآیندهای موجود ساطع می‌کند. اندازه‌گیری شدت تابش ایکس نرم پلاسما در ماشین‌های توکامک، یکی از مهمترین روش‌های تشخیصی برای یافتن پارامترهای اصلی پلاسما به شمار می‌رود [1]. مطالعه این تابش‌ها، اطلاعات ارزشمندی در مورد موقعیت و شکل پلاسما (توموگرافی پلاسما)، توزیع ناخالصی‌ها، ماهیت ایجاد

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

ناپایداری‌های مخرب، مطالعه پدیده‌های مگنتوهیدرودینامیک و همچنین تعیین میانگین دمای الکترون ارائه می‌دهد [2-3]. از این‌رو سامانه تشخیصی ایکس نرم به عنوان یک ابزار تشخیصی اصلی در زمینه ارزیابی عملکرد مناسب پلاسمای توکامک و اندازه‌گیری پارامترهای مهم پلاسما مورد استفاده قرار می‌گیرد. رایج‌ترین کاربرد سامانه ایکس نرم، توموگرافی[1] پلاسما در ماشین توکامک است که با قرارگیری چندین دوربین در اطراف محفظه خلاء توکامک (صفحه قطبی[2]) انجام می‌شود.

توانایی بازسازی اشکال پیچیده پلاسما به تعداد دوربین‌هایی که در اطراف سطح مقطع پلاسما قرار گرفته‌اند بستگی دارد.هدف از انجام این پژوهش طراحی مفهومی سامانه تشخیصی ایکس نرم متناسب با ساختار و ویژگی‌های توکامک دماوند می‌باشد. همچنین نحوه‌ی تعیین موقعیت و بهینه‌ی تعداد دوربین‌ها در پورت‌های تشخیصی این توکامک، جهت انجام فرآیند توموگرافی، به‌کمک آزمون پوشش[3] بیان خواهد شد.

توکامک دماوند

توکامک دماوند از دسته توکامک‌های کوچک با سطح مقطع محفظه D شکل است. ساختار بدنه این توکامک، قابلیت استفاده همزمان از سه پورت تشخیصی در یک صفحه قطبی را فراهم می‌کند. در این ساختار، دو پنجره در بالا و پایین و یک پنجره با دهانه بازتر در صفحه افقی z=0 وجود دارد.

پورت‌های بالا و پایین از لحاظ اندازه کاملا مشابه و قرینه هم بوده و با اندازه‌گیری‌های انجام شده ملاحظه گردید که می‌توان از یک طراحی مشابه برای سامانه ایکس نرم در این دو پورت استفاده نمود. با توجه به ابعاد پورت‌های تشخیصی توکامک دماوند انتظار می‌رود که در پورت افقی امکان نصب حداکثر سه دوربین و در پورت‌های عمودی تنها یک دوربین وجود داشته باشد.

سامانه تشخیصی ایکس نرم

سامانه تشخیصی پرتوهای ایکس نرم از چندین دوربین توزیع شده در اطراف پلاسما تشکیل می شود. هر دوربین این سامانه متشکل از شکاف، فیلتر و آشکارساز است که هر آشکارساز پلاسما را از طریق شکاف دوربین می بیند[4].

آشکارساز در نظر گرفته شده در این سامانه، فوتودیود خطی AXUV-16EL محصول شرکت IRD است که متشکل از ۱۶ فوتودیود مستطیلی با ناحیه فعال ۵×۲ میلی‌متر مربع برای یک پیکسل است. لذا بطور مثال تعداد کانال‌های نمونه‌برداری با انتخاب چهار سنسور AXUV، برابر با ۶۴ کانال خروجی خواهد بود.

تابش‌های پلاسمای توکامک از طریق یک صفحه دایروی دارای شکاف وارد این سامانه می‌شوند. وظیفه این جزء، تنظیم شدت پرتوهای ورودی به دوربین، محدود کردن زاویه دید سامانه و افزایش نسبت سیگنال به نویز است. برای پوشش سطح مقطع قطبی کل و بدست آوردن قدرت تفکیک فضایی مناسب، اندازه شکاف و موقعیت نسبی آن‌ها نسبت به سنسور و محور مرکزی پلاسما بهینه می شود.

در طراحی دوربین‌های موجود در کلیه پورت‌ها از شکافی با ابعاد ۱×۵ میلی‌متر مربع استفاده شده است. پارامترهای هندسی مربوط به هر دوربین در جدول ۱ آورده شده‌است.

جدول ۱: مشخصات دوربین‌های پورت افق، بالا و پایین توکامک دماوند.

	دوربین موجود در پورت افق	دوربین موجود در پورت بالا و پایین
فاصله سنسور مرکزی تا روزنه	۱،۵۸ سانتی متر	۵،۳۷ سانتی متر
فاصله روزنه تا محور پلاسما	۱۰،۳۶	۳۴ سانتی متر
رزولوشن فضایی	۲ سانتی متر	۲ سانتی متر

همچنین در طراحی سامانه ها، از فویل برلیوم ۷ میکرومتر برای ممانعت از ورود فوتون‌هایی با انرژی کمتر از محدوده پرتو ایکس نرم استفاده شد.

[1] Tomography
[2] Poloidal plane
[3] Coverage test

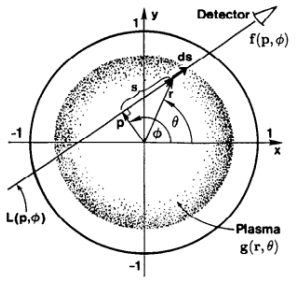
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

جریان خروجی از سنسور AXUV در بازه ۱میکروآمپر تا ۱۵میلی آمپر می‌باشد و ضروری است این محدوده جریان توسط مبدل جریان به ولتاژ به محدوده حداکثر ۱۰۰ تا ۵۰۰ میلی‌ولت تبدیل گردد. لذا در مدار پیش تقویت‌کننده، بخش تقویت باید دارای بهره ۱۰۰۰ باشد تا جریان ۱میکروآمپری را به ولتاژ ۱۰میلی ولت تبدیل نماید. در طراحی این مدار از تقویت کننده تفاضلی[۴] MAX44252 استفاده شد که دارای جریان نشتی در حد پیکوآمپر است. همچنین منبع تغذیه مورد نیاز برای راه‌اندازی مدارهای پیش تقویت ۱۵ولت در نظر گرفته شده‌است. در نهایت سیگنال‌ها به کمک دیجیتالی‌کننده که دارای یک مبدل آنالوگ به دیجیتال ۱۶بیتی برای هر کانال است ثبت می‌شوند. پس از قرارگیری دوربین‌ها در موقعیت مورد نظر، خلاء سامانه و توکامک، بطور همزمان توسط پمپ‌های توربومولکولی و جذبی تامین می‌شود. لذا خلاء این سامانه در حدود 10^{-6} تور خواهد بود.

بررسی آزمون پوشش

در توکامک دماوند بدلیل محدودیت تعداد پورت‌های تشخیصی موجود در یک سطح مقطع پولوئیدال و توزیع غیریکنواخت آن‌ها در اطراف محفظه خلاء، انجام فرآیند توموگرافی یک بحث چالش برانگیز است. لذا ضروری است بهینه تعداد دوربین‌ها و تعداد کل کانال‌ها به کمک آزمون پوشش تعیین گردد. دستگاه مختصاتی که برای تعیین موقعیت و زاویه دید هر آشکارساز به کار رفته در شکل ۱ نشان داده شده‌است.

از آنجا که سطح مقطع ناحیه تابش می‌تواند هر شکل دلخواهی داشته باشد (پلاسما به شکل دلخواهی تشکیل شود)، لذا فرض می‌شود سطح مقطع پلاسما بطور کامل درون یک دایره نرمال به شعاع واحد قرار گیرد و تابش‌های نقطه‌ای در ناحیه $(0\le\theta\le2\pi, 0\le r\le1)$ پراکنده شوند. مطابق شکل ۱، خطوطی که آشکارسازها از طریق آن توان تابش ایکس را مشاهده می‌کنند با $L(\rho,\varphi)$ نشان داده می‌شود. طبق این مختصات هر خط دید در فضای (r,θ) به یک نقطه در مختصات (ρ,ϕ) مرتبط می‌شود و مساحتی که این نقاط در نمودار (ρ,ϕ) ایجاد می‌کنند معیاری از مناسب بودن پوشش پلاسما توسط سامانه‌های ایکس نرم خواهد بود[5]. برای بررسی اثر تعداد دوربین‌ها در پوشش‌دهی محفظه، مطابق شکل ۲، چهار آرایش مختلف سامانه ایکس نرم در پورت‌های تشخیصی توکامک دماوند بکار گرفته شد.



شکل ۱: دستگاه مختصات موقعیت و زاویه دید هر آشکارساز.

نتایج کمی آزمون پوشش مربوط به آرایش‌های مذکور در جدول ۲ آمده‌است. نتایج آزمون پوشش نشان می‌دهد نصب دو و سه دوربین در پورت‌های تشخیصی توکامک، پوشش همگن مناسب را ایجاد نکرده است. این مشکل با افزایش تعداد دوربین‌ها در اطراف محفظه خلاء توکامک و یا به عبارتی افزایش تعداد خطوط دید سامانه تشخیصی قابل حل می‌باشد.

با افزایش تعداد دوربین‌ها میزان پوشش افزایش می‌یابد. همچنین با مقایسه درصد پوشش‌دهی مربوط به آرایش چهار و پنج دوربین مشخص گردید که افزایش تعداد دوربین ها تغییر قابل ملاحظه‌ای در مقدار پوشش‌دهی ایجاد نکرده است. لذا با این روش، بهینه تعداد دوربین‌ها برای داشتن حداکثر پوشش مورد نیاز تعیین شد.

جدول ۲: میزان پوشش‌دهی برای آرایش دو، سه، چهار و پنج دوربین

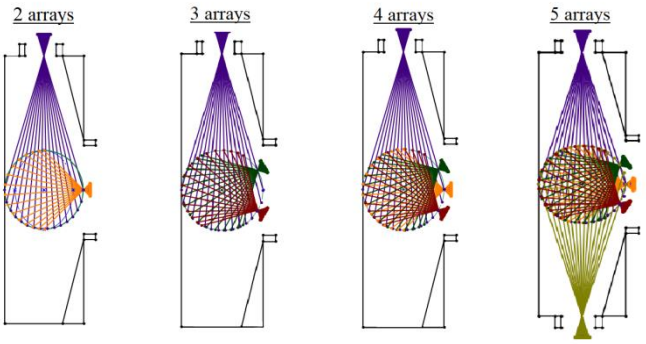
تعداد دوربین	۲	۳	۴	۵
مقدار پوشش‌دهی	۰/۱۶	۰/۲۷	۰/۳۹	۰/۴۱

علاوه بر آرایش چهار دوربین مطابق شکل ۲، پوشش‌دهی مربوط به آرایش دیگر، مطابق با شکل ۳ بررسی شد. در این چیدمان جزئیات طراحی جفت دوربین‌های یک و چهار و همچنین دوربین‌های دو و سه یکسان می‌باشد. دوربین‌های دو و سه در پورت افقی با زاویه $\pm15^{\circ}$ و در فاصله ۱۰،۳۶ سانتی‌متر از مرکز محفظه قرار دارند. همچنین دوربین‌های یک و چهار بصورت

[۴] Operational Amplifier

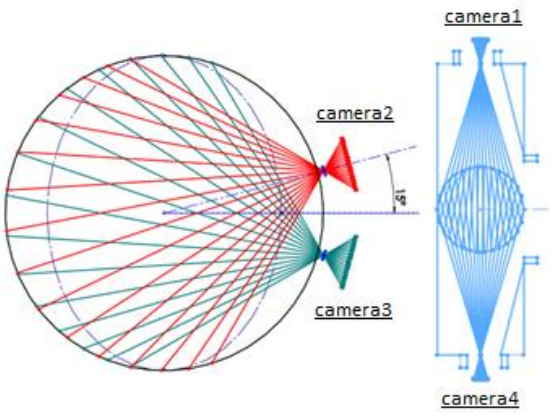
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

عمودی، بترتیب در پورت بالا و پایین و در فاصله‌ی ۳۴ سانتی‌متر از مرکز محفظه نظرگرفته شده‌است و در مجموع سامانه ایکس نرم از طریق ۶۴ خط دید پلاسما را اسکن می‌کنند.



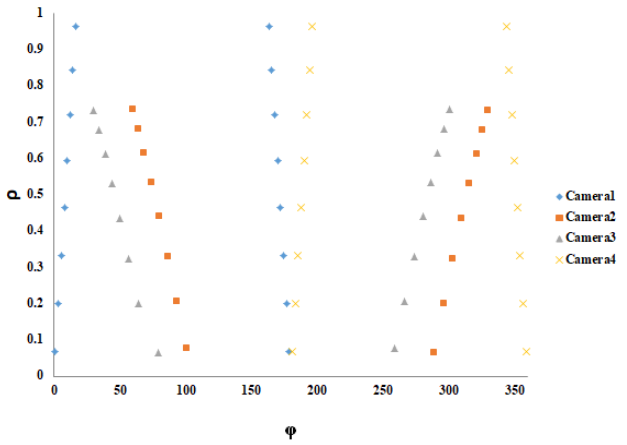
شکل ۲: چیدمان مختلف سامانه‌های تشخیصی ایکس نرم در اطراف محفظه خلاء توکامک دماوند.

در ابتدا پارامتر موثر به شعاع دایره‌ی پوشاننده نرمایزه شد و میزان پوشش در این حالت تقریبا ۲۶٪ بدست آمد. سپس با توجه به اینکه در توکامک‌ها پارامتر موثر به شعاع کوچک محفظه نرمایزه می‌شود، میزان پوشش برای توکامک دماوند با در نظر گرفتن شعاع کوچک ۷ سانتی‌متر، تقریبا ۳۰٪ محاسبه شد(شکل ۴). لازم به ذکر است در این حالت خطوط دیدی که خارج شعاع کوچک قرار دارند، حذف می‌شوند و مجموع خطوط دید از ۶۴ به ۵۶ کاهش می‌یابد. مقایسه میزان پوشش بدست آمده از آرایش چهار دوربین در شکل ۲وشکل ۳ بیانگر آن است که آرایش متقارن دوربین ها در پورت‌های بالا و پایین تاثیر قابل ملاحظه‌ای در افزایش پوشش ایجاد نکرده‌است.



شکل ۳: آرایش چهار دوربین، دو دوربین در پورت افقی و یک دوربین در پورت بالا و پایین محفظه خلا توکامک دماوند.

برای رسم نمودار پوشش، مجموع مساحت‌های پوشش داده شده توسط کل سامانه‌ها محاسبه و بر مساحت کل تقسیم گردید.



شکل ۴: آزمون پوشش با آرایش چهار دوربین و ۶۴ کانال.

نتیجه‌گیری

برای انجام فرآیند توموگرافی به کمک سامانه تشخیصی ایکس نرم، شبیه‌سازی خطوط دید این سامانه در آرایش و موقعیت‌های مختلف از محفظه خلاء توکامک دماوند انجام و پوشش آن‌ها محاسبه شد.

نتایج به‌دست آمده نشان می‌دهد نصب و قرارگیری تعداد چهار و پنج دوربین در پورت‌های تشخیصی توکامک، پوشش مناسب را فراهم می‌کند. اگرچه پوشش مربوط به پنج دوربین در مقایسه با چهار دوربین افزایش یافته، ولی اختلاف ناچیز بین این دو بیانگر آن است که بهترین آرایش و تعداد دوربین‌ها، برای انجام فرآیند توموگرافی، آرایش چهارم مطابق با شکل ۲می‌باشد.

مرجع ها

[1] Ding, Y. H., et al. "Soft X-ray imaging diagnostic system on the J-TEXT tokamak." Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment 606.3 (2009): 743-748.
[2] Raval, Jayesh, et al. "Development of multipurpose soft x-ray tomography system for Aditya-U." Proceedings of the IAEA Fusion Energy Conference, Gandhinagar, India. 2018.
[3] Freidberg, Jeffrey P. *ideal MHD*. Cambridge University Press, 2014.
[4] Xiao, C., et al. "Design and initial operation of multichord soft x-ray detection arrays on the STOR-M tokamak." Review of Scientific Instruments 79.10 (2008): 10E926
[5] Granetz, R. S., and P. Smeulders. "X-ray tomography on JET." Nuclear fusion 28.3 (1988): 457.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تاثیر ناهمگونی منافع فردی بر ساختار شبکه‌های اجتماعی

بابائی ، زهرا[۱] ؛ نیری، محمد دهقان[۱]؛ جعفری، غلامرضا[۲]

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

[۲] دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید بهشتی، تهران

چکیده

امروزه علوم اجتماعی و خصوصا جامعه شناسی در هدایت جامعه انسانی و پیش‌بینی مسیر فکری و رفتاری انسان‌ها به ابزارهایی که علم داده و مدلسازی در اختیارش می‌گذارد رو آورده است. در این مطالعه پدیده‌های اجتماعی، با کمک مدل‌سازی در یک چارچوب ساده‌تر و دور از جزئیات تحلیل و بررسی می‌شود. اولویت بندی بین منافع فردی و گروهی رقیبانی هستند که هرکدام جامعه را به یک سو می‌کشند؛ زندگی فردی یا جمعی. اما مسئله قابل تأمل این است که آیا تفاوت در منافع فردی نیز می‌تواند شکل‌گیری روابط اجتماعی و ساختار سامانه اثرگذار باشد؟ در این پژوهش منافع فردی را ناهمگن درنظر گرفتیم و متوجه شدیم که برخی از این منافع فردی مانند ستون فقرات سامانه عمل می‌کنند و دینامیک مدل را هدایت می‌کند و بسیاری از روابط حول این ستون فقرات شکل می‌گیرد.

واژه های کلیدی *شبکه های اجتماعی، مدل خوشه ای اشتراس، ناهمگنی روابط اجتماعی، خوشه بندی، رقابت بین منافع محلی و جهانی*

The effect of heterogeneity of individual benefits on the structure of social networks

Babaee, Zahra[1]; Niry, MohammadD.[1]; Jafari, Gholam Reza[2]

[1] *Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences (IASBS), Zanjan, Iran*
[2] *Department of Physics, Shahid Beheshti University, Tehran, Iran*

Abstract

Today, the social sciences, and especially sociology, have turned to the tools provided by science and modeling in guiding human society and predicting the intellectual and behavioral path of human beings. In this study, social phenomena are analyzed with the help of modeling in a simpler and far from detailed framework. Prioritization between individual and group interests are competitors that each pull society to one side; Individual or collective life. But the question is whether the difference in individual interests can also affect the formation of social relations and the structure of the system? In this study, we considered individual interests as heterogeneous and found that some of these individual interests act as the backbone of the system and guide the dynamics of the model, and many relationships are formed around this backbone.

***Keywords**: social networks, Strauss cluster model, heterogeneity of social relations, clustering, competition between local and global benefit*

مقدمه

مطالعه جامعه با بکارگیری ابزارهایی که فیزیک سامانه‌های پیچیده در اختیار پژوهشگران قرار می‌دهد، کارآمد و جذاب است و نتایج آن می‌تواند در پیش‌بینی روابط اجتماعی و مدیریت جوامع سودمند باشد. این رهیافت، جامعه را به عنوان شبکه‌ای در نظر می‌گیرد که افراد گره‌های آن و ارتباط بین آنها یال‌های آن محسوب می‌شوند. با این تعبیر می‌توان انواع پدیده‌های جامعه‌شناسی مانند، الگوهای دوستی بین افراد، روابط تجاری بین شرکت‌ها و .. را مورد مطالعه قرار داد [۱]. مدلسازی شبکه اجتماعی در شرایط مختلف، ویژگی‌هایی را نمایان می‌کند که نشان دهنده یک پدیده اجتماعی است. نمونه‌ای از این ویژگی‌ها توزیع یال‌ها است که راپوپورت، بر اهمیت آن در انواع شبکه‌ها تأکید کرده است [۲]. این ویژگی که بر دینامیک اثر می‌گذارد را با بررسی خوشه‌بندی نیز مطالعه می‌کنند. خوشه‌بندی، یعنی تراکم بالای تعامل‌ها که باعث ایجاد دسته‌ها با اندازه‌های مختلف در شبکه می‌شود. نیومن نشان داد که

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

خوشه‌بندی می‌تواند تأثیر قابل توجهی بر ساختار شبکه‌های بزرگ داشته باشد و در بررسی شبکه‌های اجتماعی از اهمیت به سزایی برخوردار است [۳].

در مطالعه سامانه‌هایی نظیر سیستم‌های زیستی، اجتماعی و ... ویژگی‌هایی پدیدار می‌شود که تاثیر آن فراتر از تعاملات دوگانه است. در واقع نیاز به بررسی اثر تعاملات مرتبه بالاتر در این شبکه‌ها احساس می‌شود. هایدر یکی از جامعه شناسانی بود که با اشاره به این مسئله، بیان کرد که تعاملات انسانی فراتر از برهمکنش‌های دوتایی رایج فیزیکی است و تعامل‌های سه‌گانه را به عنوان پایه روابط اجتماعی معرفی کرد. سپس اشتراس و همکارانش از این مفهوم برای معرفی منافع محلی و جهانی استفاده کردند[۴]. این مفاهیم موثر بر سرنوشت شبکه و توزیع یال‌ها در آن هستند. با تفسیر تعاملات دوگانه به عنوان منفعت فردی (محلی) و تعامل سه‌گانه به عنوان منفعت اجتماعی (جهانی)، با این واقعیت روبرو هستیم که تعاملات مرتبه بالاتر در مطالعه رفتار پیچیده شبکه‌ها از اهمیت بالایی برخوردار است. بعدها، نیومن با روش تئوری میدان متوسط برای مدل اشتراس حل تحلیلی ارائه کرد که در حد شبکه‌های بزرگ حل دقیق محسوب می‌شد [٤].

در جوامع انسانی دیده می‌شود که برخی از روابط، اهمیت و پایداری بیشتری نسبت به سایرین دارند. یکسان نبودن اهمیت روابط یا بعبارتی ناهگمنی بر سرنوشت جامعه موثر است. به عنوان مثال روابط تجاری بین دوستان قدیمی، گروه‌های موفق‌تر و پایدارتری را ایجاد می‌کند. مدل اشتراس برای سادگی، همه روابط را همگن در نظر می‌گیرد. در حالی که اعمال این ناهمگنی اثرات جالبی بر دینامیک شبکه دارد. در شرایطی که مقدار ضریب منافع محلی از یک توزیع گاوسی انتخاب شود، نقطه گذار فاز و پارامترهای بحرانی شبکه با نتایج نیومن متفاوت است [٦]. در این مطالعه علاقه‌مند هستیم که تاثیر این ناهمگنی را بر ساختار شبکه و نوع ارتباطی که بین رأس‌های آن شکل می‌گیرد، بررسی کنیم.

معرفی مدل

مدل اشتراوس مبتنی بر رقابت بین منافع محلی و جهانی است. سهم این دو عنصر به ترتیب در جمله اول و دوم هامیلتونی زیر گنجانده شده است:

$$H(S) = \theta \sum_{i<j} s_{ij} - \alpha \sum_{i<j<k} s_{ij}\, s_{jk} s_{ki}, \qquad (۱)$$

که در آن s_{ij} عنصری از ماتریس مجاورت شبکه G است که شامل N رأس است. مقادیر ممکن s_{ij}، $\{۰، ۱\}$ است که به ترتیب نشان دهنده عدم وجود و وجود پیوند بین رأس‌های i و j است. از آنجایی که روابط دو طرفه هستند، ماتریس مجاورت متقارن است $s_{ij} = s_{ji}$. شبکه G یک پیکربندی خاص از مجموعه‌ای از حالت‌های ممکن را نشان می‌دهد که می‌تواند با تنظیم درآیه‌های ماتریس مجاورت ایجاد شود. جمله اول هامیلتونی (۱) بر شکل‌گیری روابط فردی اثر دارد، افزایش θ انرژی شبکه را افزایش می‌دهد که مطلوب نیست. بنابراین چگالی پیوندها کاهش می‌یابد. هنگامی که این جمله غالب باشد، ایجاد یک پیوند بین دو گره گران خواهد بود، چون باعث افزایش انرژی کل شبکه می‌شود، در نتیجه رابطه بین رأس‌ها تنک خواهد ماند. جمله دوم به ازای $\alpha > 0$ ایجاد سه‌گانه را تشویق می‌کند. ضریب α قدرت روابط سه‌گانه را نشان می‌دهد. با وجود علامت منفی در جمله دوم مقادیر بزرگ مثبت α باعث ایجاد سه‌گانه و به دنبال آن ایجاد خوشه‌ها می‌شود. جمله اول و دوم (۱) برای پیوندهایی که در تشکیل سه‌گانه‌ها شرکت می‌کنند، رقابت می‌کنند. شبکه برای مقادیر بزرگ θ و مقادیر کوچک α تنک خواهد بود، اما با بزرگتر شدن α، سه‌گانه‌ها بیشتر می‌شوند و تعداد پیوندها در شبکه افزایش می‌یابد. مطالعه اثر ناهمگنی در مدل اشتراس نیز نتایج ارزشمندی در پی داشت [٦]. در این کار، ما مقادیر تصادفی غیر یکنواخت را به هر پیوند نسبت می‌دهیم. این مقادیر تصادفی را از یک توزیع گاوسی با یک مقدار میانگین خاص $(\bar{\theta})$ و واریانس (σ^2) انتخاب کرده و آنها را θ_{ij} می‌نامیم. به این ترتیب مجموعه‌ای از θ_{ij}ها خواهیم داشت که برای هر پیوند مقدار متفاوتی دارد. این مقادیر یخ زده هستند، یعنی در مقیاس زمانی که پیوندها تحول می‌یابند، ثابت هستند. هامیلتونی معرفی شده به شرح زیر است:

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$$H(S) = \sum_{i<j} \theta_{ij}\, s_{ij} - \alpha \sum_{i<j<k} s_{ij}\, s_{jk} s_{ki}. \qquad (۲)$$

مقدار تصادفی اختصاص یافته به هر پیوند، θ_{ij}، نشان می‌دهد که همه روابط به یک اندازه مهم نیستند. $\bar{\theta}$ مقدار مثبت مشخصی است. زیرا هر فرد درجاتی از خودخواهی و انزوا دارد که با افت‌وخیز θ_{ij} حول $\bar{\theta}$ مشخص می‌شود. احتمال حذف پیوندهایی با مقادیر زیاد θ_{ij} بیشتر از پیوندهای با θ_{ij} کوچک است. مقدار میانگین $\bar{\theta}$ به گونه‌ای است که θ_{ij}های منفی به ندرت ظاهر شوند. مقادیر منفی θ_{ij} مطلوب هستند، زیرا انرژی شبکه را کاهش می‌دهند. بنابراین این پیوندها معمولاً مانند یک *ستون فقرات* دائمی رفتار می‌کنند و در ایجاد سه‌گانه‌ها شرکت می‌کنند. کسر θ_{ij}های منفی به مقادیر $\bar{\theta}$ و σ بستگی دارد. رقابت بین دو جمله هامیلتونی و ضرایب آنها، پیکربندی‌های مختلف شبکه را ایجاد می‌کند. ضریب ثابت α در جمله دوم هامیلتونی قدرت روابط سه‌گانه را نشان می‌دهد. علامت مثبت جمله اول تاکید می‌کند که شبکه اجتماعی طبیعی تمایل دارد خلوت باشد و جمله دوم با بزرگتر شدن α، احتمال تشکیل سه‌گانه‌ها را افزایش می‌دهد. حل تحلیلی هامیلتونی (۲) وقوع یک انتقال فاز مرتبه اول را در فضای فاز پارامترهای هامیلتونی نتیجه داده است [۵]. در اینجا، با استفاده از الگوریتم متروپلیس–هستینگ، تراکم و ساختار اتصال پیوندها را بررسی می‌کنیم.

شبیه‌سازی

برای شبیه‌سازی، شبکه‌ای به اندازه N = ۱۰ در نظر گرفته و توزیع جفت پیوندها، به ازای مقدار α =۰/۸۶ ، $\bar{\theta}$ =۲ و σ = ۱.۶ بررسی می‌شود.

معادله (۲) شبکه‌ای شامل N رأس است و هر پیوند می‌تواند ۰ یا ۱ باشد، بنابراین دو حالت برای هر پیوند امکان‌پذیر است. در نتیجه N^2 میکروحالت برای شبکه، محتمل است. هر میکروحالت وابسته به تعداد پیوندها و تعداد سه‌گانه‌ها، انرژی مشخصی دارد. این انرژی در نظریه هایدر با تنش در جامعه معادل است.

در الگوریتم متروپلیس در هر مرحله، یک یال را به صورت تصادفی انتخاب کرده و انرژی شبکه، قبل و بعد از تغییر وضعیت آن یال محاسبه می‌شود. انرژی قبل و بعد از تغییر با E_1 و E_2 نشان داده می‌شود، بنابراین $\Delta E = E_2 - E_1$ اگر $\Delta E \leq 0$، احتمال گذار $W_{1\to2} = 1$ است و تغییر وضعیت یال پذیرفته می‌شود. اگر $\Delta E > 0$، برای سیستمی که در حالت تعادل است، از احتمال بولتزمن استدلال می‌شود:

$$p(G_1) W_{1\to2} = p(G_2) W_{2\to1}.$$

$p(G) = Z^{-1} e^{-H(G)}$ و Z تابع پارشی است که توزیع احتمال را بهنجار می‌کند. $W_{1\to2} = e^{-\Delta E}$ احتمال گذار از حالت ۱ به ۲ است. در نتیجه با به کاربردن الگوریتم متروپلیس، احتمال پذیرش تغییر وضعیت یال حتی با افزایش انرژی کل وجود دارد. در این پژوهش مراحل مونت کارلو تا زمانی که شبکه به حالت تعادل برسد، تکرار می‌شود. سپس ماتریس S ذخیره می‌شود. با تکرار مراحل بالا به ازای مجموعه θ_{ij}های تکراری، یک ماتریس S جدید به‌دست می‌آید که درآیه‌های آن می‌تواند متفاوت از ماتریس قبلی باشد. با تکرار این مراحل و میانگین‌گیری روی مقادیر s_{ij}، به ازای نمونه‌های متعدد، ماتریس مجاورت وزنی شبکه محاسبه می‌شود. این ماتریس وزنی، احتمال وجود یا عدم وجود هر یال را نشان می‌دهد. این احتمال تحت تأثیر پارامتر α و θ_{ij} مربوط به آن یال است.

برای مثال در جدول (۱) متوسط آنسامبلی احتمال اتصال هر گره با سایر گره‌ها برای شبکه‌ای که ناهمگنی به آن اعمال نشده (مدل اشتراس) و شبکه مورد مطالعه که دارای ناهمگنی خاص است، گزارش شده است. عمدا برای همه نمونه‌ها از یک ناهمگنی یکسان استفاده شده تا نشان داده شود ناهمگنی ورای افت و خیز سبب ناهمگنی در متوسط احتمالات شده است.

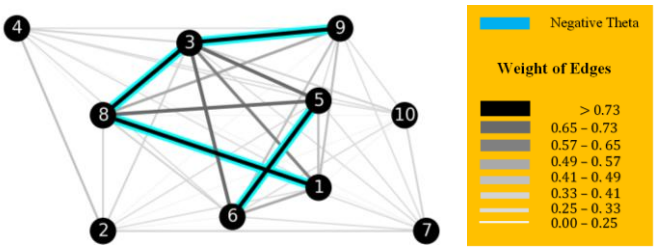
جدول ۱: مقایسه احتمال اتصال گره‌ها با وجود همگنی و ناهمگنی در شبکه.

متوسط وزن یال‌های هر گره برای حالت همگن									
۱	۲	۳	٤	٥	٦	۷	۸	۹	۱۰
۰/۳۹	۰/۳۹	۰/۳۹	۰/۳۹	۰/۳۹	۰/۳۹	۰/۳۹	۰/۳۹	۰/۳۹	۰/۳۹
متوسط وزن یال‌های هر گره برای حالت ناهمگن									
۱	۲	۳	٤	٥	٦	۷	۸	۹	۱۰
۰/٤٤	۰/۳۱	۰/٥٥	۰/۲۸	۰/٤٤	۰/٤۳	۰/۲۸	۰/٥۰	۰/٤۰	۰/۲۸

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

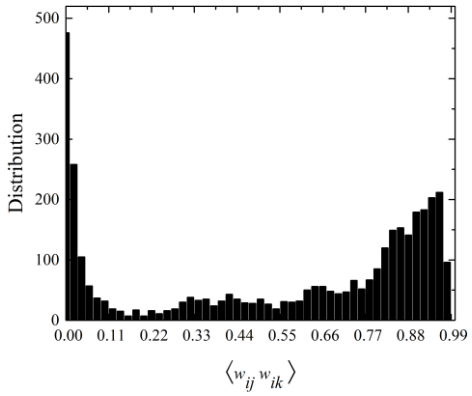
شکل ۱ نمونه‌ای از گراف‌های مورد مطالعه را نمایش می‌دهد. خطوطی که گره‌ها را بهم وصل می‌کند با ضخامت‌های مختلف رسم شده است، تا احتمال‌ها را در ماتریس مجاورت وزندار بنماید. با توجه به اینکه وجود یال‌هایی که θ_{ij} منفی دارند محتمل‌تر است؛ یال‌ها با θ_{ij} منفی با سایه فیروزه‌ای رنگ مشخص شده‌اند.

در این مدل، ناهمگنی یال‌ها سرنوشت شبکه را تغییر می‌دهد و می‌توان گفت شکل گیری پیوندها را هدایت می‌کنند. این چنین روابطی در جوامع انسانی نیز قابل مشاهده است.



شکل ۱: نمونه‌ای از شبکه با وجود ناهمگنی در θ_{ij}ها.

برای مثال افرادی در جامعه اصرار به حفظ برخی از روابط خود به دلیل روابط خونی، دوستی‌های قدیمی، اهداف مشترک فکری و ... دارند، زمانی که این دوستان اقدام به یک کار تجاری مشترک می‌کنند به علت اهمیت رابطه دونفره بین آنها معمولا نتایج بهتری می‌گیرند. آنها قادرند برای گسترش این منفعت مشترک، بسیاری از روابط دیگر خود را قطع کنند یا باعث ایجاد روابط جدید شوند. زیرا در این راه اراده و اصرار زیادی دارند. وزن‌دار شدن یال‌ها پیامد جالب توجه دیگری نیز به دنبال دارد. وجود این یال‌ها با توجه به جمله دوم هامیلتونی بر تشکیل یال‌های همسایه نیز اثر می‌گذارد تا دسته‌های سه‌تایی را تقویت کند. در واقع یال‌های محتمل‌تر در اطراف این *ستون فقرات* شکل می‌گیرند. برای شهود بیشتر این پیامد، شکل ۲ رسم شد. در این نمودار توزیع مقادیر جفت پیوندها نمایش داده می‌شود. جفت پیوند همان حاصل‌ضرب دو به دو درآیه‌های ماتریس وزنی است که یک رأس مشترک دارند. این کمیت احتمال وجود یک جفت پیوند را نشان می‌دهد. توزیع احتمال شکل ۲ دو قله‌ای شده است. یکی از قله‌ها در ابتدای محور است که مقدار حاصل‌ضرب‌های کوچک یا زوج پیوندهای ضعیف را نشان می‌دهد. با توجه به میانگین وزنی یال‌های شبکه که در جدول ۱ هم مشخص است، پیوندها عموما از این گونه‌اند. درنتیجه این قله باید بلندتر باشد. قله دیگر در انتهای سمت راست نمودار، نشان دهنده زوج پیوندهای قویست. مقادیر میانی هم ارتباط بین یال‌های ضعیف و قوی را نمایش می‌دهد. طبق انتظار، مقدار آن خیلی کمتر است.



شکل ۲: توزیع جفت پیوندها در شبکه‌ای با ۱۰ گره.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش اثر ناهمگنی بر مدل اشتراس مطالعه کردیم. ناهمگنی در متوسط احتمال تشکیل یال‌ها منعکس می‌شود. با وجود ناهمگنی در شبکه یک *ستون فقرات* نمایان می‌شود. این *ستون فقرات* متعلق به یال‌هایی است که θ_{ij} آنها منفی است. توزیع جفت پیوندها نیز وجود پیوندهای قوی و ضعیف را تایید می‌کند. نتایج حاصل نشان می‌دهد که اختلاف بین منافع محلی تأثیر قابل توجهی بر پویایی شبکه دارد به طوری‌که این اختلاف تشکیل یا عدم تشکیل پیوندها را هدایت می‌کند.

مرجع‌ها

[1] M.E. Newman, “The structure and function of complex networks”. SIAM Rev, 45(2), pp.167-256, 2003.
[2] A. Rapoport, “Contribution to the theory of random and biased nets”, Bulletin of Math. Biophys, 19, 257–277, 1957.
[3] M. E. Newman, “Properties of highly clustered networks”, Phys. Rev. E **68**, 026121, 2003.
[4] D. Strauss, “On a general class of models for interaction”, SIAM Rev, 28(4), pp.513-527, 1986.
[5] J. Park and M. E. Newman, “Solution for the properties of a clustered network”, Phys. Rev. E **72**, 026136, 2005.
[6] Z. Babaee et al., “Individual versus Social Benefit on the Heterogeneous Networks”, Phys. Rev. E 105, 044307, 2022.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی ابتدا به ساکن خواص الکترونی و مکانیکی تک لایه B_2CS

یزدان صفت، حبیب اله ؛ اشهدی، مجتبی

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان، ایران

چکیده

بر پایه محاسبات اصول اولیه، خواص الکترونی و مکانیکی نانوساختار تک لایه B_2CS مورد مطالعه قرار گرفته است. ساختار نواری، چگالی حالت‌های الکترونی و ثابت‌های الاستیک بر پایه نظریه تابعی چگالی با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم- اسپرسو (QE)، محاسبه شده‌اند. نانوساختار تک لایه B_2CS نیم‌رسانا است به‌طوری‌که مقدار گاف نواری آن ۱٫۱۷ (گاف غیر مستقیم) الکترون ولت به‌دست آمد. همان‌طور که از مقادیر محاسبه شده مشاهده می‌شود، در محدوده تغییر شکل الاستیک هارمونیک، سختی در صفحه B_2CS مقدار ۲۹۷ N/m به‌دست آمد که حدود ۱۱٪ کمتر از مقدار مربوط به گرافین است.

واژه های کلیدی: *ساختار نواری الکترونی، چگالی حالت‌ها، ثابت‌های الاستیک مکانیکی، نظریه تابعی چگالی، نانوساختار تک لایه B_2CS.*

A first-principles study of the electronic and mechanical properties of B_2CS monolayer

Yazdansefat, Habiballah; Ashhadi, Mojtaba

Department of Physics, Faculty of Science, University of Sistan and Baluchestan, Zahedan, Iran

Abstract

Based on first-principles calculations, we study the electronic and mechanical properties of monolayer nanostructure of B_2CS. We calculated the electronic band structure, density of states and the mechanical elastic parameters based on density functional theory (DFT) and using the QUANTUM ESPRESSO computational package. The monolayer nanostructure of B_2CS is semiconductor and band gap value was obtained as 1.17 eV (indirect band). As seen from the calculated values, in the harmonic elastic deformation region, the in-plane stiffness of B_2CS was obtained to be 297 N/m which is about 11% less than that of graphene.

***Keywords**: The electronic band structure, Density of states, The mechanical elastic parameters, DFT, Monolayer nanostructure of B_2CS,*

PACS No. 73, 62

مقدمه

امروزه بررسی خواص فیزیکی مواد دوبعدی، به‌واسطه خواص جالب‌توجه و کاربردهای متنوع آن‌ها، از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. ازآنجایی‌که کاربردهای گرافین به گاف نواری صفر آن محدود می‌شود لذا یافتن مواد دوبعدی جایگزین در جایگاه ویژه‌ای ای قرار دارد. تاکنون تعداد زیادی از مواد دو بعدی با خواص فیزیکی متفاوتی پیشنهاد شده‌اند که شامل شش‌ضلعی بورن- نیترید (h-BN) [۱]، پنج ضلعی گرافین [۲]، استانین [۳]، سیلیسن [۴] می‌باشند. ماهیت الکتریکی یک ماده دوبعدی ممکن است از فاز عایق تا فلز تغییر کند به‌طوری‌که یک ماده دوبعدی می‌تواند عایق، نیم‌رسانا، فلز، نیم‌فلز، یا خاصیت ابررسانایی را از خود نشان دهد. در میان همه‌ی مواد دوبعدی، نیم‌رساناهای دوبعدی از اهمیت ویژه‌ای برخوردار هستند. پیشنهاد یک نیم‌رسانای تک لایه دو بعدی با ویژگی‌های الکتریکی جدید نه تنها یک مسأله علم مواد

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

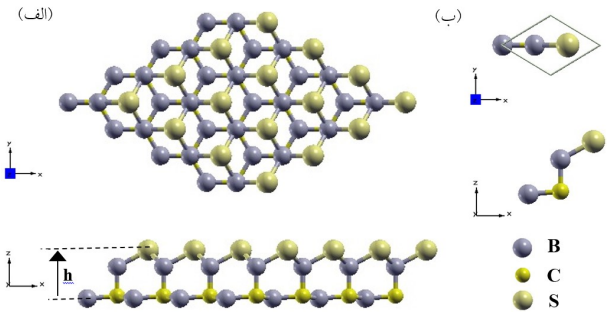
است بلکه از نظر فنی نیز حائز اهمیت می‌باشد. در مطالعه اخیری که بر پایه محاسبات اصول اولیه انجام شده است، یک گروه تحقیقاتی اثبات کردند که نانوساختار تک لایه B_2CS می‌تواند وجود داشته باشد[۵]. پایداری ترمودینامیکی این ماده دو بعدی پیشنهادی با محاسبه انرژی همبستگی و پایداری دینامیکی آن با محاسبه پراکندگی فونون بررسی شده است. خواص مناسب این نانوساختار، موجب شده که در زمینه‌های متعددی در صنعت کاربرد داشته باشد [۵].

روش محاسبات

در این فصل، ابتدا محاسبات اصول اولیه بر اساس نظریه تابعی چگالی، با استفاده از بسته نرم افزاری کوانتوم- اسپرسو [۶] انجام و برای تعیین پتانسیل همبستگی- تبادلی از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) که توسط پردو، بورکه و ارنزرهوف پارامتریزه شده [۷]، استفاده شده است. انرژی کل و سایر کمیت‌های مربوط به آن با استفاده از روش شبه‌پتانسیل و روش موج تخت محاسبه شده است. از آنجا که محاسبات به روش خود سازگار و برای مجموعه معینی از نقاط درون منطقه اول بریلوئن انجام می‌شود، لذا دقت و سرعت محاسبات بستگی شدیدی به انتخاب صحیح پارامترهایی نظیر تعداد نقاط k و انرژی قطع دارد، که در قسمت بعدی توضیحات بیشتری ارائه می‌شود. برای دستیابی به دقت مناسب در محاسبات از روش مونخورست- پک و انرژی قطع ۵۰Ry و تحت نمونه برداری از منطقه اول بریلوئن ۱×۱۲×۱۲، استفاده کرده‌ایم. ثابت شبکه و مکان‌های اتمی را به‌طور کامل واهلش کرده تا همگرایی انرژی حدود 10^{-10} Ry و نیروی وارد بر هر اتم کمتر از ۰٫۰۰۱ Ry/au شود و برای کمینه کردن انرژی نسبت به موقعیت اتم‌ها قضیه هلمن- فاینمن را به‌کار برده‌ایم. همچنین برای بهینه-سازی حجم، ۱۵Å خلأ، برای جلوگیری از اندرکنش بین لایه‌ها در یاخته‌های مجاور استفاده شده است. .

نتایج و بحث

انتظار می‌رود که نانوساختار تک لایه B_2CS، دارای خواص مختلف قابل توجهی و نیز پتانسیل بالقوه‌ای برای آینده نانو الکترونیک باشند. به‌ویژه، ساختار نواری الکترونی و طیف چگالی حالت‌ها، به‌عنوان یک عامل اصلی در تعیین خواص الکترونی، مورد توجه زیادی قرار گرفته است. بر این اساس در این بخش، نتایج مربوط به خواص ساختاری و الکترونی نانو ساختار تک لایه B_2CS، را مورد بحث قرار می‌دهیم. یاخته اولیه نانوساختار مورد بررسی در این پژوهش به‌صورت یاخته شش‌ضلعی با چهار اتم (یک اتم گوگرد، یک اتم کربن و دو اتم بورن) در نظر گرفته شده است. طرح‌واره‌ای از این چنین نانوساختار در شکل ۱ نشان داده شده است.



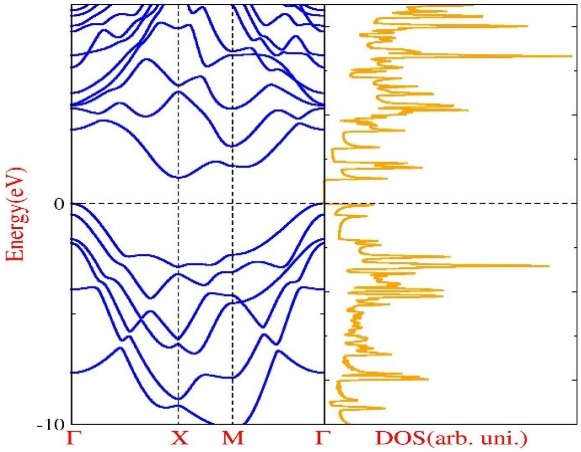
شکل ۱. (الف) نمای بالا و جانبی ساختار تک لایه B_2CS و (ب) سلول واحد تک لایه B_2CS از نمای بالا و جانبی.

با توجه به بهینه‌سازی انجام شده در قسمت قبل، ثابت شبکه بهینه‌سازی شده و همچنین طول خمیدگی برای B_2CS، a=۲٫۸۵Å، h=۲٫۶۹Å می‌باشند. با نگاهی دقیق به شبکه بلوری تک لایه B_2CS، مشاهده می‌شود که تک لایه از دو صفحه شش-ضلعی بورن- کربن (شامل شش‌ضلعی‌های B-C با طول پیوند d_{B-C}=۱٫۶۱Å) و بورن- گوگرد (شامل شش‌ضلعی‌های B-S با طول پیوند d_{B-S}=۱٫۸۹Å) که توسط پیوندهای B-C با طول پیوند Δ_{B-C}=۱٫۶۳Å متصل هستند، تشکیل شده است. نتایج در جدول ۱ ارائه شده است. به‌منظور بررسی خواص الکترونی نانوساختار تک لایه B_2CS منحنی چگالی حالت‌های کل و ساختار نوار الکترونی در طول راستاهای تقارنی Γ-X-M-Γ، برای این نانوساختار در شکل ۲ رسم شده است.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

جدول ۱. ثابت‌های شبکه بهینه‌سازی شده، طول خمیدگی، h، و طول‌های پیوند ساختار تک لایه B_2CS

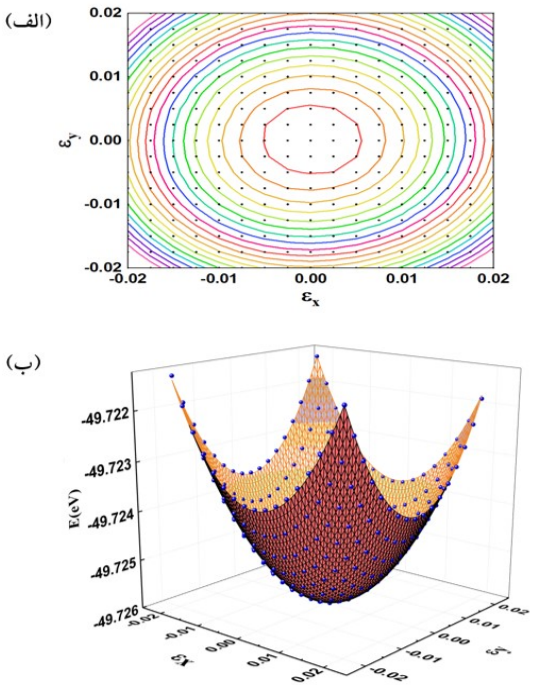
ساختار	a(Å)	$d_{B\text{-}C}$(Å)	$d_{B\text{-}S}$(Å)	$\Delta_{B\text{-}C}$(Å)	h(Å)
B_2CS	۲٫۸۵	۱٫۶۱	۱٫۸۹	۱٫۶۳	۲٫۶۹



شکل ۲. ساختار نواری (سمت چپ) و چگالی حالت‌های الکترونی (سمت راست) تک لایه B_2CS، با گاف نواری غیر مستقیم ۱٫۱۷ eV، در طول راستاهای تقارنی، Γ(۰، ۰، ۰)، X(۰٫۵، ۰، ۰)، M(۰٫۵، ۰٫۵، ۰) و Γ(۰، ۰، ۰) رسم شده است. مقیاس انرژی بر حسب eV و مبدأ انرژی به‌طور دلخواه به‌عنوان بیشینه نوار ظرفیت انتخاب شده است.

در ساختار نوار الکترونی رسم شده، انرژی فرمی به‌عنوان مبدأ انتخاب شده و مقیاس انرژی برحسب الکترون- ولت می‌باشد. در منحنی‌های چگالی حالت‌های کل رسم شده، انرژی صفر الکترون- ولت نشان دهندهٔ تراز فرمی است که با خط چین نشان داده شده است. همان‌طور که از شکل ۲ مشاهده می‌شود، نانوساختار رفتار نیم‌رسانا از خود نشان می‌دهد، به‌طوری‌که ساختار تک لایه B_2CS، گاف نواری غیرمستقیم (ماکزیمم نوار ظرفیت در نقطه Γ، و مینیمم نوار رسانش در نقطهX) به میزان ۱٫۱۷ eV را از خود نشان می‌دهد. مطابقت ساختار نواری الکترونی این ترکیب با منحنی چگالی حالت‌های کلی آن، می‌تواند دلیلی بر صحت محاسبات انجام شده باشد. نتایج محاسبه شده با آنچه که در مرجع [۵] گزارش شده است، توافق قابل قبولی دارند.

در ساختارهای دوبعدی، ثابت‌های الاستیک مکانیکی توسط دو ثابت مستقل، سختی در صفحه C و نسبت پواسون ν، توصیف می‌شوند. سختی در صفحه به‌صورت مشتق دوم انرژی کل نسبت به کرنش در مساحت تعادلی توسط رابطه $Y=(1/A_0)(\partial^2E/\partial^2\varepsilon)$ تعریف می‌شود [۸]،که در آن A_0، E و ε به‌ترتیب مساحت تعادلی، انرژی کل و کرنش تک محوره $\varepsilon=(a-a_0)/a_0$ که a_0 و a به‌ترتیب، ثابت‌های شبکه تعادلی و کرنش داده شده است) می‌باشند.



شکل ۳. (الف) داده شبکه‌ای $(\varepsilon_x;\ \varepsilon_y)$ استفاده شده در محاسبات انرژی کل و (ب) منحنی سه بعدی انرژی کل برای هر یک از ساختارهای کرنش داده شده. گلوله‌های آبی رنگ کوچک داده‌های اصلی هستند و سطح رنگی مقدار برازش شده را نشان می‌دهد.

نسبت پواسون نیز به‌صورت نسبت کرنش عرضی به کرنش محوری توسط رابطه $\nu=-\varepsilon_{عرضی}/\varepsilon_{محوری}$ بیان می‌شود. یاخته اولیه مورد بررسی در محاسبات برای نانوساختار تک لایه B_2CS، در شکل ۱ (ب) رسم شده است. برای محاسبه خواص کشسانی ساختارهای فوق، از روش توصیف شده در مرجع [۸] استفاده می‌کنیم. در این محاسبات هر دو کرنش فشاری و کششی مورد بررسی قرار گرفته است. در محدوده تغییر شکل کشسانی

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

هارمونیک، کرنش به سلول واحد بین ۰٫۰۲- تا ۰٫۰۲ برای هر راستای x و y با افزایش ۰٫۰۰۲۵ اعمال می‌شود. همان‌طور که از شکل ۳ (الف) مشاهده می‌شود، داده شبکه‌ای (ε_x; ε_y) که حاوی ۲۸۹ نقطه است برای تک لایه B_2CS به‌دست می‌آید. برای هر نقطه شبکه، موقعیت‌های اتمی متناظر با این سلول‌ها کاملاً بهینه-سازی می‌شوند و انرژی کل آن‌ها محاسبه می‌گردد، نتایج در شکل ۳ (ب) نشان داده شده است. با استفاده از روش کمترین مربعات، داده‌ها به رابطه $E-E_0=a_1\varepsilon_x^2+a_2\varepsilon_y^2+a_3\varepsilon_x\varepsilon_y$ برازش می‌شوند که در آن E_0 انرژی ساختار در حالت تعادل، ε_x و ε_y به‌ترتیب، کرنش در امتداد جهت‌های x و y می‌باشند. نمودار انرژی- کرنش سه بعدی برای ساختار تک لایه B_2CS در شکل ۳ (ب) نشان داده شده است. با بکارگیری این رابطه و بعضی محاسبات، می‌توان سختی در صفحه را به‌صورت $C=\frac{1}{A_0}(2a_1-\frac{a_3^2}{2a_1})$ و نسبت پواسون بدون بعد را نیز $\nu=\frac{a_3}{2a_1}$ نشان داد. نتایج در جدول ۲ ارائه شده است. همان‌طور که در جدول ۲ مشخص شده است، B_2CS دارای نسبت پواسون منفی است. مواد با نسبت پواسون منفی، طیف گسترده‌ای از کاربردهای بالقوه در زیست پزشکی، صنایع هوا فضا و ابزار دقیق را نشان می‌دهند[۹، ۱۰].

جدول ۲. ثابت‌های الاستیک مکانیکی برای نانوساختاره تک لایه B_2CS

ساختار	سختی در صفحه(N/m)	نسبت پواسون
B_2CS	۲۹۷	-۰٫۰۲

وجود اتم‌های بورن و گوگرد در ساختار B_2CS تاثیر قابل توجهی در خواص مکانیکی آن دارد. برای مقایسه بهتر نتایج با مقادیر به-دست آمده برای گرافین، مشاهده می‌شود که سختی در صفحه در ساختار B_2CS به میزان ۱۱ درصد کوچک‌تر از تک لایه کربنی گرافین، با مقدار ۳۳۵ N/m، است [۱۱]. بنابراین، ساختار B_2CS نسبت به گرافین نرم‌تر است.

نتیجه گیری

در این پژوهش، خواص ساختاری، الکترونی و مکانیکی نانوساختار تک لایه B_2CS با استفاده از نظریه تابعی چگالی مورد بررسی قرار گرفت. بررسی نتایج نشانگر وجود یک گاف نواری غیر مستقیم به میزان ۱٫۱۷ eV می‌باشد. برای بررسی خواص مکانیکی B_2CS، ثابت‌های الاستیک مکانیکی همچون سختی در صفحه و نسبت پواسون بررسی شدند. نتایج نشان می‌دهد که سختی در صفحه B_2CS کوچک‌تر از گرافین است، به‌طوری‌که سختی در صفحه برای B_2CS و گرافین به‌ترتیب، ۲۹۷ N/m و ۳۳۵ N/m است.

مرجع‌ها

[۱] C. Zhi, Y. Bando, C. Tang, H. Kuwahara, D. Golberg, Large-Scale Fabrication of Boron Nitride Nanosheets and Their Utilization in Polymeric Composites with Improved Thermal and Mechanical Properties, *Advanced Materials* **21,** No. 28 (2009) 2889.
[۲] S. Zhang, J. Zhou, Q. Wang, X. Chen, Y. Kawazoe, P. Jena, Penta-graphene: A new carbon allotrope, *PNAS* **112,** No. 8 (2015) 2372-2377.
[۳] S. Saxena, R. P. Chaudhary, S. Shukla, Stanene: Atomically Thick Free-standing Layer of 2D Hexagonal Tin, *Scientific Reports*, **6** (2016) 31073.
[۴] S. Huang, W. Kang, L. Yang, Electronic structure and quasiparticle bandgap of silicene structures, *Applied Physics Letters*, **102,** No. 13 (2013) 133106.
[۵] M. M. Abutalib, Two dimensional B_2CX (X=O, S, Se) monolayer semiconductors for water splitting application, *Superlattices and Microstructures*, **149** (2021) 106759.
[۶] P. Giannozzi, and et al., A modular and open-source software project for quantum simulations of materials, *Journal of Physics: Condensed Matter* **21**, No. 39 (2009) 395502-39552.
[۷] J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Generalized Gradient Approximation Made Simple, *Physical Review Letters* **77**, No. 18, (1996) 3865-3868.
[۸] R.C. Andrew, R. E. Mapasha, A. M. Ukpong, N. Chetty, Mechanical properties of graphene and boronitrene, *Physical Review B* **85**, No. 12 (2012) 125428.
[۹] L. Yu, Q. Yan, A. Ruzsinszky, Negative Poisson's ratio in 1T-type crystalline twodimensional transition metal dichalcogenides, *nature communications*, **8** (2017) 15224.
[۱۰] M. Yagmurcukardes, H. Sahin, J. Kang, E. Torun, F.M. Peeters, R.T. Senger, Pentagonal monolayer crystals of carbon, boron nitride, and silver azide, *Journal of Applied Physics*, **118** (2015) 104303.
[۱۱] M. Topsakal, S. Cahangirov, S. Ciraci, The response of mechanical and electronic properties of graphane to the elastic strain, *Applied Physics Letters,* **96** (2010) 091912(3).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

پاسخ غیرخطی مدل کیتائف توسعه‌یافته

نگهداری ، محمدکاظم[۱] ؛ لنگری، عبدالله[۱]

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

چکیده

مایع اسپینی کوانتومی حالتی از سیستم‌های مغناطیسی است که فیزیک جذابی مثل کسری‌شدگی درجات آزادی و پدیدار شدن میدان‌های پیمانه‌ای نوظهور را از خود نشان می‌دهد. نبود پارامتر نظم موضعی و کسری‌شدن درجات آزادی، شناسایی این حالت از ماده را با کاوش‌های متعارف چالش برانگیز کرده‌است. مطالعات نظری اخیر نشان می‌دهد پاسخ غیرخطی چند بعدی می‌تواند اطلاعات جدیدی از برانگیختگی‌های کسری‌شده در این گونه سیستم‌ها به دست دهد، به طوری که شناسایی بدون ابهام و واضحی از این برانگیختگی‌ها را ممکن می‌کند. با نمایش اسپین‌ها با فرمیون‌های مایورانا، مدل کیتائف توسعه‌یافته که مدل موثر همیلتونی کیتائف در میدان مغناطیسی است را به صورت دقیق حل کردیم و در اینجا پاسخ غیرخطی دوبعدی آن را گزارش می‌کنیم. در این نمایش، پاسخ غیرخطی را در زیرفضای فیزیکی و غیرفیزیکی برای سیستم‌هایی با اندازه‌های مختلف محاسبه کردیم و متوجه شدیم که پاسخها در این دو زیرفضا تقریبا یکسان هستند. علاوه بر این، مشاهده کردیم در پاسخ غیرخطی اطلاعات جدیدی از برانگیختگی‌های شار در این مدل بدست می‌آید که در پاسخ خطی دیده نمی‌شود.

واژه های کلیدی: *مایع اسپینی کوانتومی، فرمیون‌های مایورانا، برانگیختگی‌های کسری، طیف سنجی دوبعدی غیرخطی*

Nonlinear Response of The Extended Kitaev Model

Negahdari, Mohammad Kazem[۱]; Langari, Abdollah[۱]

[۱] *Department of Physics, Sharif University of Technology, Tehran*

Abstract

Quantum spin liquid is a state of spin systems that exhibit fascinating physics such as fractionalization of degrees of freedom and emergent gauge fields. The lack of a local order parameter and fractionalization in these states have made their identification by conventional probes challenging. Recent theoretical studies show that multi-dimensional nonlinear response can provide new information about the fractionalized excitations in these exotic states, which makes possible unambiguous and clear identification of these excitations. By representing spins with Majorana fermions, we solved the extended Kitaev model exactly and report its two-dimensional nonlinear response. In this representation, we computed the nonlinear response in the physical and unphysical subspaces for systems with different sizes and found that the response in these two subspaces is almost the same. In addition, we observed that in the nonlinear response, new information about the flux excitations in this model is obtained that is not seen in the linear response.

***Keywords**: Quantum spin liquid, Majorana fermions, fractionalized excitations, Two-dimensional nonlinear spectroscopy*

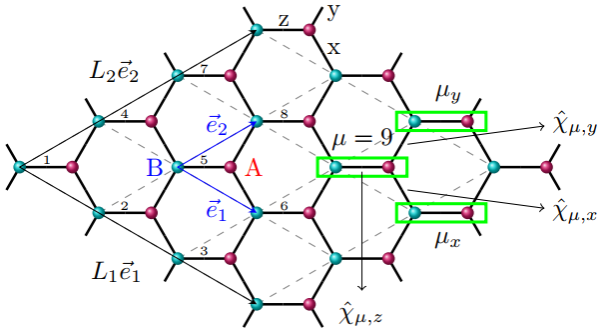
PACS No.

مقدمه

در مواد مغناطیسی متعارف با کاهش دما وجود برهمکنش بین اسپین‌ها منجر به یک گذرفاز از حالت بی‌نظم به حالت منظم می‌شود. اما اندرسون در سال ۱۹۷۳ این ایده را مطرح کرد که در سیستم‌های مغناطیسی درمانده حتی تا دماهای بسیار پایین‌تر از مقیاس برهمکنش‌ها، ممکن است تقارنی شکسته نشود و نظمی در آنها

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

پدیدار نگردد به طوری که این درماندگی منجر به پایداری حالت جدیدی در اینگونه سیستم‌ها شود [۱] که امروز به عنوان مایع اسپینی کوانتومی (QSL) شناخته می‌شود. تقریبا با گذشت پنج دهه از معرفی این حالت هنوز در تعریف آن اتفاق نظر دقیقی وجود ندارد، با این حال با پیروی از مرجع [۲] می‌توان آن را حالتی از ماده که دارای برانگیختگی‌های کسری‌شده و میدان‌های پیمانه‌ای نوظهور است، تعریف کرد. مدل‌های مختلفی وجود دارند که تحقق فاز QSL در آنها گزارش شده است، اما مدل لانه زنبوری کیتائف [۳] به دلیل حل‌پذیری دقیق و تحقق آن در برخی از مواد که به عنوان مواد کیتائف شناخته می‌شوند [٤] ، توجه زیادی را به خود معطوف کرده



شکل ۱: شبکه لانه زنبوری با شرایط مرزی دوره‌ای و نه سلول واحد. شرایط مرزی را می‌توان با انتخاب L_1 و L_2 تغییر داد. برای این شکل $L_1=L_2=3$ است. فرمیون‌های مختلط نیز روی آن مشخص شده است.

است. در این مقاله تمرکز ما روی مدل موثری است که از محاسبه اختلالی میدان مغناطیسی روی مدل کیتائف بدست می‌آید [۳] و آن را تحت عنوان مدل کیتائف توسعه یافته نام می‌بریم.

مدل

مدل کیتائف توسعه یافته، برهمکنش بین اسپین‌های ۱/۲ (σ_i^α) روی شبکه لانه زنبوری را طبق همیلتونی زیر توصیف می‌کند (شکل ۱):

$$H = -\sum_{<ij>_\alpha} J_\alpha \sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha - K \sum_{\substack{<ik>_\alpha,<kj>_\beta \\ \gamma\perp\alpha,\beta}} \sigma_i^\alpha \sigma_j^\gamma \sigma_k^\beta \qquad (۱)$$

که برهمکنش سه اسپینی نماینده اثر میدان مغناطیسی در بسط اختلالی است. برای مدل بالا ثابت‌های حرکت زیادی وجود دارد که حل پذیری دقیق آن نیز از همین جا نشات می‌گیرد. در واقع به ازای هر پلاکت p در شبکه یک ثابت حرکت W به نام عمگر شار وجود دارد که حاصلضرب شش اسپین موجود روی رئوس آن پلاکت است. اگر $W=-1$ باشد در آن پلاکت شار وجود دارد و اگر $W=+1$ باشد، شاری در آن نیست. چون شارها ثابت حرکت هستند می‌توان در هر زیرفضایی با شار مشخص همیلتونی را قطری کرد. کیتائف با معرفی چهار فرمیون مایورانا (b_j^α, c_j)، اسپین‌ها را به صورت $\sigma_j^\alpha = ib_j^\alpha c_j$ ، $\alpha=x,y,x$، نمایش داد و همیلتونی بالا را به صورت دقیق حل کرد. این نمایش باعث می‌شود در هر جایگاه از شبکه فضای هیلبرت دو برابر شود، بنابراین همه حالت‌هایی که در نمایش جدید بدست می‌آیند در حالت کلی لزومی ندارد در زیر فضای اسپینی اولیه که زیر فضای فیزیکی مسئله است قرار گیرند. با یک عملگر تصویر می‌توانیم خود را به زیرفضای فیزیکی در فضای هیلبرت گسترش یافته که ناشی از نمایش بالا است، محدود کنیم. در نمایش بالا، همیلتونی (۱) برای پیکربندی معینی از شار به یک همیلتونی درجه دوم بر حسب فرمیون‌های مایورانای c به صورت زیر تبدیل می‌شود [٥]:

$$H_u = \frac{i}{2}(c_A^T \quad c_B^T)\begin{pmatrix} F & M \\ -M^T & -D \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_A \\ c_B \end{pmatrix} \qquad (۲)$$

که در آن ماتریس M پرش همسایه اول و ماتریس F و D پرش همسایه دوم است. این ماتریس‌ها از مشخص کردن عملگرهای باند $u_{<jk>_\alpha} = ib_j^\alpha b_k^\alpha$ که ثابت حرکت هستند، تعیین و از طریق رابطه $W=\prod_{<ij>\in \partial p} u_{<ij>}$ با عملگرهای شار مرتبط می‌شوند. بردار c_A دربردارنده همه فرمیون‌های مایورانا c در زیر شبکه A است. چون پیکربندی شارها به حاصل ضرب u_{ij} ها وابسته است نه به خود آنها به صورت انفرادی، میدان‌های پیمانه‌ای نوظهور Z_2 در مسئله پدیدار می‌شوند، به طوری که هرحالت فیزیکی را می‌توان با برچسب‌های مختلفی از u_{ij} ها مشخص کرد. اندیس u در H_u به این معناست که همیلتونی برای یک پیکربندی معین از u_{ij} ها نوشته شده است. با توجه به این درجه آزادی پیمانه‌ای، فضای هیلبرت به دو بخش ماده و پیمانه تفکیک می‌شود به طوری که برانگیختگی‌های ماده توسط دینامیک فرمیون‌های مایورانا c و برانگیختگی‌های پیمانه توسط ایجاد شارهای جایگزیده در سیستم به وجود می‌آیند. از آنجایی که قطری کردن همیلتونی فرمیون‌های استاندارد یا مختلط

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

نسبت به فرمیون‌های مایورانا سرراست تر است، فرمیون‌های مختلط زیر را تعریف می‌کنیم [۵] و در نهایت همیلتونی تولید شده توسط آنها را قطری خواهیم کرد:

$$f_\mu = \frac{1}{2}(c_{\mu A} + ic_{\mu B}), \quad \chi_{\mu,z} = \frac{1}{2}(b^z_{\mu A} - ib^z_{\mu B}) \qquad (۳)$$

$$\chi_{\mu,y} = \frac{1}{2}\left(b^y_{\mu A} - ib^y_{\mu_y B}\right), \quad \chi_{\mu,x} = \frac{1}{2}\left(b^x_{\mu A} - ib^x_{\mu_x B}\right) \qquad (٤)$$

فرمیون‌های مختلط $\chi_{\mu,\alpha}$ دینامیکی ندارند و روی باندهای شبکه جایگزیده هستند، شکل ۱، و از طریق اشغال یا عدم اشغال آنها روی باندهای شبکه از طریق رابطه $u_{ij} = 1 - 2\chi^\dagger_{ij}\chi_{ij}$، می‌توان بخش شار را مشخص کرد. بر حسب فرمیون‌های مختلط همیلتونی سیستم به صورت زیر داده می‌شود:

$$H_u = \frac{1}{2}(f^\dagger \quad f)\begin{pmatrix} h & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} f \\ f^\dagger \end{pmatrix} \qquad (۵)$$

که در آن h و Δ ماتریس‌هایی هستند که برحسب ماتریس‌های M، F و D داده می‌شوند. همیلتونی بالا را با استفاده از یک تبدیل بوگولیوبوف می‌توان به صورت زیر قطری کرد:

$$H_u = \sum_n \varepsilon_n a^\dagger_n a_n - \frac{1}{2}\sum_n \varepsilon_n \qquad (٦)$$

که در آن $\varepsilon_n \geq 0$ برانگیختگی‌های ماده و $a^\dagger_n$ عملگر خلق‌کننده ویژه مدهای سیستم است. همان طور که در ابتدا اشاره شد، برای رفتن به زیرفضای فیزیکی در نمایش جدید نیاز به یک عملگر تصویر داریم، به طوری که حالت‌های فیزیکی از رابطه زیر بدست می‌آیند [٦]:

$$|\psi_{phy}\rangle = P|\psi_u\rangle, \quad P = SP. \qquad (۷)$$

که در آن S به صورت هم‌وزن روی همه پیکربندی‌های پیمانه که متناظر با یک حالت فیزیکی است جمع می‌زند و $P = \frac{1+D}{2}$. عملگری است که فیزیکی بودن یا نبودن حالت $|\psi_u\rangle$ را به ترتیب با $D = +1$ و $D = -1$ مشخص می‌کند.

طیف‌سنجی غیرخطی دوبعدی

در طیف‌سنجی غیرخطی دوبعدی [۷]، دو پالس مغناطیسی قطبیده در راستاهای e_α و e_β با تاخیر زمانی τ_1 سیستم را مختل می‌کنند،

$$B(t) = B_\alpha \delta(t) e_\alpha + B_\beta \delta(t - \tau_1) e_\beta \qquad (۸)$$

سپس در زمان τ_1 بعد از پالس دوم، مغناطش سیستم در راستای e_γ اندازه‌گیری می‌شود، $M^\gamma_{\alpha\beta}(\tau_1 + \tau_2)$. برای اینکه پاسخ‌های خطی حذف شوند، دو آزمایش جداگانه با تک پالس‌های B_α و B_β انجام می‌شود تا به ترتیب مغناطش‌های $M^\gamma_\alpha(\tau_1 + \tau_2)$ و $M^\gamma_\beta(\tau_1 + \tau_2)$ اندازه‌گیری شود. در نهایت پاسخ غیرخطی با تعریف مغناطش غیرخطی به صورت زیر بدست می‌آید:

$$M^\gamma_{NL}(\tau_1 + \tau_2) = M^\gamma_{\alpha\beta}(\tau_1 + \tau_2) - M^\gamma_\alpha(\tau_1 + \tau_2) - M^\gamma_\beta(\tau_1 + \tau_2) \qquad (۹)$$

اگر سیستم در حالت پایه خود قرار داشته باشد و مغناطش آن نیز در این حالت صفر باشد، با درنظر گرفتن برهمکنش میدان مغناطیسی با سیستم به صورت برهمکنش زیمن، در چارچوب نظریه اختلال، مغناطش غیرخطی به صورت زیر بدست می‌آید [۸]:

$$\frac{M^\gamma_{NL}(\tau_1 + \tau_2)}{2N} = B_\alpha B_\beta \chi^{2,\gamma}_{\alpha\beta}(\tau_1, \tau_2) + B_\beta B_\alpha B_\alpha \chi^{3,\gamma}_{\beta\alpha\alpha}(\tau_2, \tau_1, 0) + B_\beta B_\beta B_\alpha \chi^{3,\gamma}_{\beta\beta\alpha}(\tau_2, 0, \tau_1) + O(B^4) \qquad (۱۰)$$

که در آن N تعداد سلول‌های واحد شبکه است. پذیرفتاری مرتبه دوم از توابع همبستگی اسپینی سه نقطه‌ای بدست می‌آیند که برای این مدل دقیقا صفر می‌شوند. بنابراین به عنوان اولین مرتبه غیرصفر به سراغ دو پذیرفتاری مرتبه سوم می‌رویم که از روابط زیر بدست می‌آیند:

$$\chi^{3,\gamma}_{\beta\alpha\alpha}(\tau_2, \tau_1, 0) = \frac{1}{N}\sum_{l=1}^{4} \mathrm{Im}[R^{(l),\gamma}_{\beta\alpha\alpha}(\tau_2, \tau_1, 0)] \qquad (۱۱)$$

$$\chi^{3,\gamma}_{\beta\beta\alpha}(\tau_2, 0, \tau_1) = \frac{1}{N}\sum_{l=1}^{4} \mathrm{Im}[R^{(l),\gamma}_{\beta\beta\alpha}(\tau_2, 0, \tau_1)] \qquad (۱۲)$$

در هر یک از پذیرفتاری‌های بالا چهار تابع همبستگی چهار نقطه‌ای وجود دارد که به عنوان نمونه، $R^{(1),\gamma}_{\beta\alpha\alpha}(\tau_2, \tau_1, 0)$ اینگونه داده می‌شود:

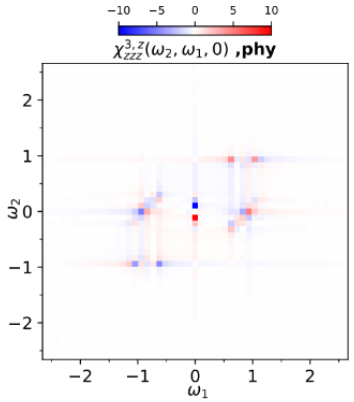
$$R^{(1),\gamma}_{\beta\alpha\alpha}(\tau_2, \tau_1, 0) = \langle M^\alpha_I(0) M^\beta_I(\tau_1) M^\gamma_I(\tau_1 + \tau_2) M^\alpha_I(0)\rangle \qquad (۱۳)$$

نتایج و پاسخ‌های غیرخطی

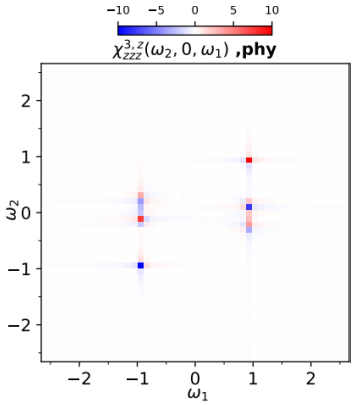
محاسبات ما نشان می‌دهد حالت پایه فیزیکی مدل کیتائف توسعه یافته در نقطه همسانگرد $J_x = J_y = J_z = 1$ و $K = 0/2$، در بخش دو-شار قرار می‌گیرد و حالت پایه غیرفیزیکی آن در بخش صفر-شار. پیچیدگی محاسباتی برای بدست آورن پاسخ فیزیکی بسیار بیشتر از پاسخ غیرفیزیکی است. محاسبات ما در اندازه‌های محدود $N = 49,81,121,169,225$ نشان می‌دهد در قطبش $\alpha = \beta = \gamma = z$ برای

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

پالس‌های مغناطیسی، پاسخ‌های فیزیکی و غیرفیزیکی نتایج تقریبا یکسانی را بدست می‌دهند. بنابراین برای رفتن به اندازه‌های بزرگتر برای سیستم، به طوری که به حد ترمودینامیک نزدیک شویم، می‌توانیم پاسخ غیرفیزیکی را که پیچیدگی کمتری دارد محاسبه کنیم.



شکل۲: تبدیل فوریه پذیرفتاری $\chi^{3,z}_{zzz}(\tau_2,\tau_1,0)$ برای سیستمی با ۲۲۵ سلول واحد و شرایط مرزی دوره‌ای. فرکانس‌های ω_1 و ω_2 به ترتیب متناظر با زمان‌های τ_1 و τ_2 است.



شکل۳: تبدیل فوریه پذیرفتاری $\chi^{3,z}_{zzz}(\tau_2,0,\tau_1)$ برای سیستمی با ۲۲۵ سلول واحد و شرایط مرزی دوره‌ای. فرکانس‌های ω_1 و ω_2 به ترتیب متناظر با زمان‌های τ_1 و τ_2 است.

در شکل۲ و شکل۳ به ترتیب تبدیل فوریه پذیرفتاری $\chi^{3,z}_{zzz}(\tau_2,\tau_1,0)$ و $\chi^{3,z}_{zzz}(\tau_2,0,\tau_1)$ برای سیستمی با پارامترهای $L_1=L_2=15$ مطابق شکل۱، که ۲۲۵ سلول واحد را تولید می‌کند، در نقطه همسانگرد و $K=0/2$ نشان داده شده است. این دو پاسخ را در زیرفضای فیزیکی و با استفاده از تقریب برانگیختگی‌های تک ذره‌ای محاسبه کردیم [۵]. پاسخ بدست آمده کاملا با پاسخ مدل کیتائف خالص [۸]، یعنی بدون جمله سه اسپینی در معادله (۱)، متفاوت است. به عنوان نمونه، در مدل کیتائف خالص در پذیرفتاری شکل۳ سیگنال‌های قطری دیده می‌شوند که در این مدل وجود ندارند، در واقع این سیگنال‌های قطری در این مدل بسیار ضعیف هستند و به همین دلیل دیده نمی‌شوند. محاسبات نشان می‌دهد تقریبا تمام پاسخ سیستم از حالت‌های مقید زیرگاف که بیانگر فاز غیرآبلی این مدل است و برانگیختگی‌های شار ناشی می‌شوند. علاوه بر این می‌توان نشان داد که در پاسخ غیرخطی نشانه‌های جدیدی از حالت‌های مختلف شار وجود دارد که در پاسخ خطی مشاهده نمی‌شوند.

نتیجه گیری

در این پژوهش پاسخ غیرخطی مدل کیتائف توسعه یافته را به صورت عددی محاسبه کردیم و تفاوت آن را با مدل کیتائف خالص بیان نمودیم. برای اندازه‌های مختلفی از سیستم پاسخ غیرخطی را در زیرفضای فیزیکی و غیرفیزیکی محاسبه و مشاهده کردیم، در این دو زیرفضا تقریبا پاسخ یکسانی بدست می‌آید. محاسبات نشان می‌دهد تقریبا تمام پاسخ از برانگیختگی‌های شار و حالت‌های مقید زیرگاف نشأت می‌گیرند. علاوه بر این اشاره کردیم که با استفاده از پاسخ غیرخطی می‌توان اطلاعات جدیدی از برانگیختگی‌های شار بدست آورد که در پاسخ خطی وجود ندارند.

مرجع‌ها

[۱] P. W. Anderson. "Resonating valence bonds: A new kind of insulator?." *Materials Research Bulletin* ۸،۲ (۱۹۷۳): ۱۵۳-۱۶۰.
[۲] J. Knolle, and R. Moessner. "A field guide to spin liquids." *Annual Review of Condensed Matter Physics* ۱۰ (۲۰۱۹): ٤٥١-٤٧٢.
[۳] A. Kitaev. "Anyons in an exactly solved model and beyond." *Annals of Physics* ۳۲۱،۱ (۲۰۰٦): ۲-۱۱۱.
[٤] G. Jackeli, and G. Khaliullin. "Mott insulators in the strong spin-orbit coupling limit: from Heisenberg to a quantum compass and Kitaev models." *Physical review letters* ۱۰۲،۱ (۲۰۰۹): ۰۱۷۲۰٥.
[٥] J. Knolle, et al. "Dynamics of fractionalization in quantum spin liquids." *Physical Review B* ۹۲،۱۱ (۲۰۱٥): ۱۱٥۱۲۷.
[٦] F.L Pedrocchi, S. Chesi, and D. Loss. "Physical solutions of the Kitaev honeycomb model." *Physical Review B* ۸٤،۱٦ (۲۰۱۱): ۱٦٥٤۱٤.
[۷] Y. Wan, and N. P. Armitage. "Resolving continua of fractional excitations by spinon echo in THz ۲D coherent spectroscopy." *Physical Review Letters* ۱۲۲،۲٥ (۲۰۱۹): ۲٥۷٤۰۱.
[۸] W. Choi, K. H. Lee, and Y. B. Kim. "Theory of two-dimensional nonlinear spectroscopy for the Kitaev spin liquid." *Physical Review Letters* ۱۲٤،۱۱ (۲۰۲۰): ۱۱۷۲۰٥.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی کاملا نسبیتی خواص ساختاری و الکترونی UO_2 به روش DFT+U با در نظر گرفتن اثرات اسپین-مدار

پیامی شبستر، محمود ؛ شیخی، سمیرا

پژوهشکده فیزیک و شتابگرها ، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای ، سازمان انرژی اتمی ایران ،انتهای خیابان کارگر شمالی ، تهران

چکیده

الکترونهای اوربیتالهای نزدیک به هسته در اتمهای سنگین دارای سرعتهایی قابل مقایسه با سرعت نور در خلا می باشند. لذا برای بررسی خواص بلور شامل اتمهای سنگین ضروریست اثرات نسبیتی حرکت الکترونها را در نظر بگیریم. در محاسبات ساختار الکترونی مواد، اثرات نسبیتی معمولا در دو سطح"اثرات نسبیتی اسکالر" و "اثرات نسبیتی کامل"در نظر گرفته می شود. در مواردی که اثرات اسپین-مدار در مقایسه با سایر اثرات نسبیتی کوچک باشد، معمولا لحاظ کردن اثرات نسبیتی اسکالر به تنهایی به جوابهای قابل قبولی منجر می شود. اما اگر اثرات اسپین-مدار قابل چشم پوشی نباشد، لازم است که محاسبات در چارچوب کاملا نسبیتی و حل معادلات دیراک-کوهن-شم صورت پذیرد. در این پژوهش، در چارچوب روش ابتدا به ساکن مبتنی بر DFT+U ساختار الکترونی و هندسی دی اکسید اورانیوم UO_2 را در فرمولبندیهای کاملا نسبیتی ، نسبیتی اسکالر ، و غیرنسبیتی محاسبه نموده و نتایج را مقایسه نموده ایم. ملاحظه می شود در نظر گرفتن اثرات اسپین-مدار گاف انرژی کوهن-شم را به اندازه ۰/۲ الکترون ولت نسبت به مقدار نسبیتی اسکالر افزایش می دهد. از طرف دیگر، در این دو رژیم تفاوت اندکی در هندسه سیستم حاصل می شود.

واژه های کلیدی: *دی اکسید اورانیوم، پاد-فرومغناطیس، نظریه تابعی چگالی، اثر اسپین-مدار، عایق مات، DFT+U*

Full-relativistic study of geometric and electronic structure of UO_2 using DFT+U method and spin-orbit effects

Payami Shabestar, Mahmoud ; Sheykhi, Samira

Physics & Accelerators Research School, Nuclear Science & Technology Research Institute, AEOI, Tehran

Abstract

Electrons of orbitals near to nuclei of heavy atoms acquire speeds comparable to the speed of light in vacuum. To study the properties of crystals containing heavy atoms, it is necessary to take into account these relativistic effects. In electronic structure calculations of materials, the relativistic effects are usually considered within two "scalar relativistic" and "full relativistic" levels. In cases where the spin-orbit effects are small compared to other relativistic effects, the scalar relativistic level of computation leads to acceptable results. However, when the spin-orbit effect is not negligible, it is necessary to use full relativistic method by solving the Dirac-Kohn-Sham equations. In this work, using the first-principles DFT+U method, we have calculated the electronic structure and geometric properties of uranium dioxide UO_2 within full-relativistic, scalar-relativistic, and non-relativistic formulations, and compared the results. It is shown that, including the spin-orbit effects increases the Kohn-Sham band-gap by a value of 0.2 eV compared to the scalar-relativistic. On the other hand, the differences in geometrical properties are small in the two methods.

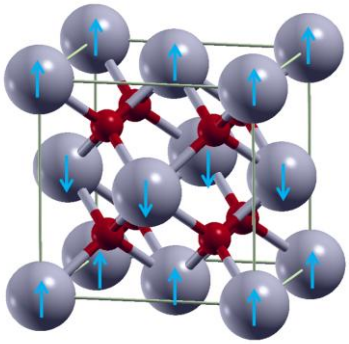
***Keywords**: Uranium dioxide, Anti-ferromagnetism, Density-Functional Theory, Spin-orbit effect, Mott Insulator, DFT+U*

PACS No 71; 73; 75

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مقدمه

دی اکسید اورانیوم به عنوان سوخت هسته ای در راکتورهای قدرت هسته ای بکار گرفته می شود. مطالعات تجربی نشان داده است که UO_2 در دماهای پایین دارای یک ساختار بلوری پادفرومغناطیس (AFM) با نظم 3k و در دماهای بالا دارای شکل پارامغناطیس می باشد. تحلیل نتایج آزمایشهای اولیه نشان داده است که اتمهای اورانیوم و اکسیژن به ترتیب در مکانهای تقارنی هشت وجهی (4a) و چهاروجهی (8c) از گروه فضایی مکعبی $Fm\bar{3}m$ (شماره ۲۲۵) با ثابت شبکه ۵/۴۷ آنگستروم قرار گرفته اند (شکل ۱) [۱]، اما آزمایشهای جدید پراکندگی اشعه X نشان داده اند که UO_2 دارای ساختار کم تقارن با گروه فضایی مکعبی $Pa\bar{3}$ (شماره ۲۰۵) می باشد که در آن اتمهای اکسیژن در داخل مکعب قدری جابجا شده اند [۲].



شکل۱ : بلور دی اکسید اورانیوم با گروه فضایی مکعبی $Fm\bar{3}m$ که در آن اتمهای اورانیوم دارای آرایش پاد-فرومغناطیس با نظم1k هستند.

ساختار الکترونی این بلور قبلا بطور محاسباتی بررسی گردیده و نشان داده شده است که تقریبهای ساده مانند LDA و GGA مورد استفاده در نظریه تابعی چگالی (DFT) برای این سیستم، که دارای الکترونهای با همبستگی قوی می باشند، رفتار نادرست فلزی پیش بینی می نمایند در حالی که در تجربه مشخص شده است که این بلور عایق می باشد و اصطلاحا "عایق مات" (Mott-Insulator) نامیده می شود. روش DFT+U یک روش نسبتا کم هزینه برای رفع این مشکل می باشد و در این تحقیق به کار گرفته شده است [۳]. در این پژوهش، آرایش پاد-فرومغناطیس با نظم 1k برای اتمهای اورانیوم در نظر گرفته شده و با اعمال قید تقارنی گروه فضایی مکعبی $Fm\bar{3}m$ بعنوان تقریب، ساختار هندسی تعادلی و ساختار الکترونی در فرمولبندی کاملا نسبیتی، که در آن اثرات اسپین-مدار ملحوظ می باشد، با استفاده از DFT+U محاسبه شده و نشان داده شده است که در نظر گرفتن اثرات اسپین-مدار گاف انرژی کوهن-شم را به اندازه ۰/۲ الکترون ولت نسبت به تقریب نسبیتی اسکالر افزایش می دهد.

معادله دیراک برای یک الکترون در میدان پتانسیل اسکالر V بصورت زیر است:

$$\hat{H}_D\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}),$$

$$\hat{H}_D = c(\vec{\alpha}\cdot\vec{p}) + \beta mc^2 + VI_4 \qquad (1)$$

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \beta = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix}$$

که در آن σ_i ها ماتریسهای پائولی هستند و I_2 ماتریس واحد با بعد ۲ می باشد. $\vec{p}$ و m و c به ترتیب مومنتوم الکترون، جرم سکون الکترون و سرعت نور در خلا می باشند. برای پتانسیل اسکالر با تقارن کروی، می توان نشان داد که معادله دیراک تبدیل به دو معادله جفت شده زیر در می آید:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}[r^2\frac{dg_{n\kappa}}{dr}] + [V + \frac{\hbar^2}{2M}\frac{l(l+1)}{r^2}]g_{n\kappa} \\ \quad -\frac{\hbar^2}{4M^2c^2}\frac{dV}{dr}\frac{dg_{n\kappa}}{dr} \qquad (2a) \\ \quad -\frac{\hbar^2}{4M^2c^2}\frac{dV}{dr}\frac{1+\kappa}{r}g_{n\kappa} = E'g_{n\kappa} \\ \frac{df_{n\kappa}}{dr} = \frac{1}{\hbar c}(V-E')g_{n\kappa} + \frac{\kappa-1}{r}f_{n\kappa} \qquad (2b) \end{cases}$$

که در اینجا

$$\Psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \psi^A(\vec{r}) \\ \psi^B(\vec{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_{nj}(r)\phi_{jlm}(\theta,\varphi) \\ if_{nj}(r)\phi_{jlm}(\theta,\varphi) \end{pmatrix} \qquad (3)$$

و به ازای $j = l \pm 1/2$ داریم:

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$$\phi_{jlm}=\sqrt{\frac{(l+1/2)\pm m}{2l+1}}\;Y_l^{m-1/2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$
$$\pm\sqrt{\frac{(l+1/2)\mp m}{2l+1}}\;Y_l^{m+1/2}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \qquad (4)$$

در روابط فوق از تعاریف زیر استفاده شده است:

$$E'=E-mc^2;\quad M(r)=m+\frac{E'-V(r)}{2c^2};$$
$$j=l+\frac{\lambda}{2};\ \kappa=-\lambda(j+\frac{1}{2});\ \lambda=+1,-1; \qquad (5)$$
$$j=l+\frac{1}{2}\Rightarrow\kappa=-(l+1);\quad j=l-\frac{1}{2}\Rightarrow\kappa=+l$$

در معادله $(2a)$، جملات دوم و سوم و چهارم در سمت چپ به ترتیب "*اثر جرم-سرعت* "، "*جمله داروین* "، و "*جمله اسپین-مدار*" هستند.

روش محاسباتی

در اینجا محاسبات بر اساس حل معادلات دیراک-کوهن-شم در DFT با استفاده از بسته محاسباتی کوانتم-اسپرسو (Quantum-ESPRESSO) انجام شده است [۴]. در محاسبات فرم گرادیانی تعمیم یافته GGA-PBEsol برای تابعی تبادلی-همبستگی در نظر گرفته شده است. برای اتمهای U و O از شبه پتانسیلهای نسبیتی نرم-پایسته (NC) استفاده شده است. در تولید شبه پتانسیل، برای اتم اورانیوم الکترونهای نیمه مغزه 6s و 6p نیز بعنوان الکترونهای والانس در نظر گرفته شده و تصحیح غیر خطی مغزه نیز اعمال شده است. برای اینکه بتوان نتایج کاملا نسبیتی را با نتایج نسبیتی اسکالر و غیرنسبیتی مقایسه نمود، در تولید شبه پتانسیلهای غیر نسبیتی و نسبیتی اسکالر اورانیوم نیز از همان شعاعهای قطع که در کاملا نسبیتی استفاده شده بود استفاده می کنیم. با انجام آزمونهای همگرایی، انرژیهای قطع برای بسط بر حسب امواج تخت به ترتیب برابر ۳۵۰ و ۱۴۰۰ ریدبرگ برای بسط توابع موج و چگالی در نظر گرفته شده اند. برای اجتناب از مشکلات مربوط به همگرایی در حل خودسازگار معادلات دبراک-کوهن-شم از روش هموارسازی (smearing) متفسل-پاکستون (MP) با پهنای ۰/۰۱ ریدبرگ جهت اشغال اوربیتالهای نزدیک به سطح فرمی استفاده نموده ایم. برای انتگرال گیریها در فضای معکوس جهت بهینه سازی ساختار هندسی و همچنین برای محاسبه چگالی حالتها (DOS) از مش ۶x۶x۶ استفاده نموده ایم. در محاسبات DFT+U مقدار موثر پارامتر هابارد U را برابر ۴/۰ الکترون ولت در نظر گرفته ایم. در محاسبات ساختار الکترونی و بهینه سازی ساختار هندسی از قید ساختاری گروه فضایی مکعبی $Fm\bar{3}m$ استفاده نموده و ساختار هندسی تعادلی را از کمینه سازی انرژی کل به دست آورده ایم.

نتایج و بحث

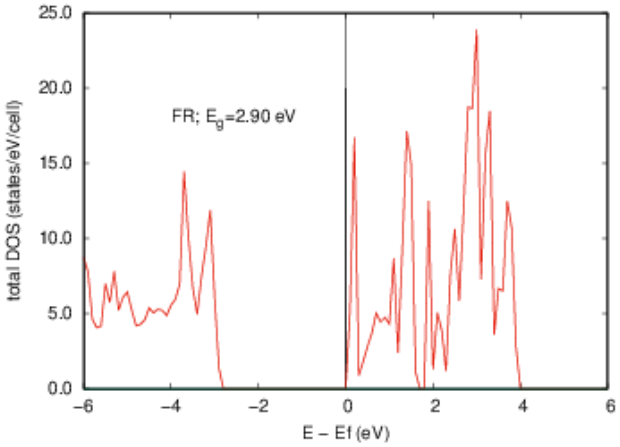
در کارهای قبلی [۵] نشان داده شده که بیشترین تطابق با تجربه به ازای استفاده از تابعی تبادلی-همبستگی GGA-PBEsol حاصل می شود و لذا شبه پتانسیلهای کاملا نسبیتی را نیز با همین تقریب تولید کرده ایم. لازم به ذکر است که چون در ساده سازی محاسبات به جای نظم 3k از نظم 1k پادفرو مغناطیس به همراه قید گروه فضایی مکعبی $Fm\bar{3}m$ استفاده کرده ایم، شکل شبکه بلور در بهینه سازی ساختار هندسی تغییر نمی کند. در جدول ۱ نتایج محاسبات درج شده است. چنانکه از جدول ملاحظه می شود، ثوابت شبکه در دو روش کاملا نسبیتی و نسبیتی اسکالر به اندازه اندک حدود ۰/۰۵٪ باهم تفاوت دارند ولی تفاوت در گاف انرژی آنها نسبتا بزرگ و در حدود ۶۲٪ می باشد. از طرف دیگر، تفاوت ثوابت شبکه در تقریبهای غیرنسبیتی و نسبیتی اسکالر نسبتا قابل ملاحظه و حدود ۲٪ می باشد و در حالت غیرنسبیتی رفتار فلزی پیش بینی می شود.

جدول۱ : ثابت شبکه بر حسب آنگستروم، مغناطش کل و مطلق بر حسب بوهر-مگنتون بر واحد فرمول، و گاف انرژی الکترونی کوهن-شم بر حسب الکترون ولت برای سه فرمولبندی کاملا نسبیتی، نسبیتی اسکالر، و غیرنسبیتی.

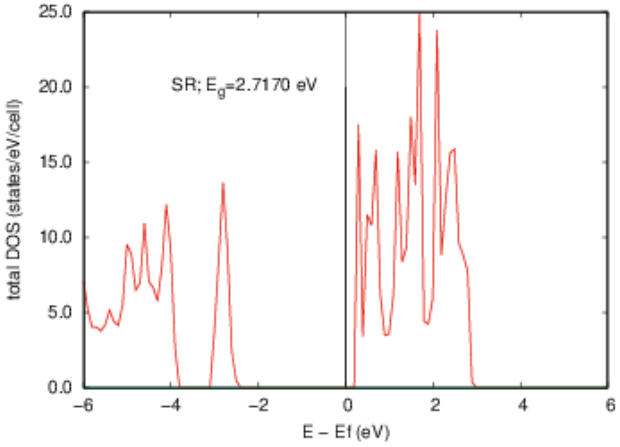
فرمولبندی	a	گاف انرژی
FR	۵/۴۷۷	۲/۹۰
SR	۵/۴۸۰	۲/۷۲
NR	۵/۵۸۸	۰/۹۷

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

در کار قبلی [۵] که نتایج غیر نسبیتی و نسبیتی اسکالر باهم مقایسه شده بودند، در تولید شبه پتانسیل اورانیوم تصحیح غیرخطی بر روی آنها اعمال شده بود و این منجر به شبه پتانسیلهای هموار در نزدیکی هسته اتم اورانیوم شده بود. همچنین، قطبش اولیه الکترونی برای اکسیژن برابر صفر در نظر گرفته شده بود. در آنجا در هر دو تقریب رفتار عایق برای سیستم پیش بینی شده بود و گافهای انرژی در غیرنسبیتی و نسبیتی اسکالر به ترتیب برابر ۰/۹ و ۲/۰ الکترون ولت بدست آمده بود.



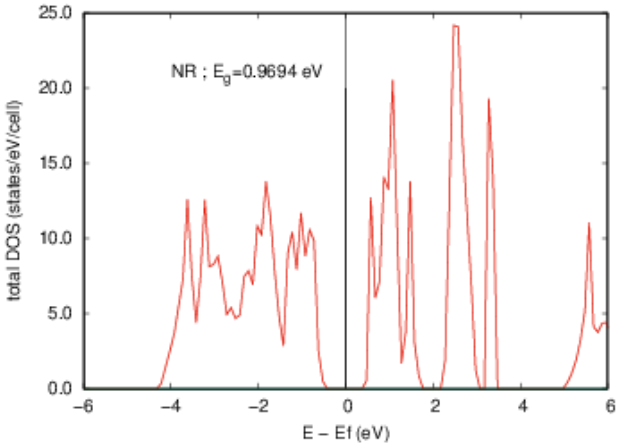
شکل۲ : چگالی حالات الکترونی کل کاملا نسبیتی بلور دی اکسید اورانیوم با گروه فضایی مکعبی $Fm\bar{3}m$ که در آن اتمهای اورانیوم دارای آرایش پاد-فرومغناطیس با نظم 1k هستند



شکل۳ : همان توضیحات شکل ۲ ولی برای تقریب نسبیتی اسکالر.

نتیجه گیری

در این پژوهش ساختار هندسی و الکترونی دی اکسید اورانیوم را بطور کاملا نسبیتی، نسبیتی اسکالر، و غیر نسبیتی با اعمال قیدهای گروه فضایی $Fm\bar{3}m$ و نظم پادفرومغناطیس یک بعدی محاسبه نموده و نتایج را باهم و با کار قبلی مان مقایسه نموده ایم. این مقایسه نشان داد که تاثیر اثر اسپین–مدار بر گاف انرژی قابل ملاحظه می باشد ولی از طرف دیگر تفاوت مقدار ثابت شبکه برای کاملا نسبیتی و نسبیتی اسکالر اندک می باشد. افزون بر این نتایج، محاسبات نشان دادند که برخلاف تصور رایج که در تولید شبه پتانسیلها وقتی الکترونهای نیمه مغزه بعنوان والانس در نظر گرفته شوند دیگر نیازی به تصحیح غیرخطی وجود ندارد، بطور عام صادق نمی باشد و امکان دارد رفتار عایق را به غلط فلزی پیش بینی نماید.



شکل۴ : همان توضیحات شکل ۲ ولی برای تقریب غیرنسبیتی.

مرجع‌ها

[۱] M. Idiri, et al., *Physical Review* B **70** (2004) 014113.

[۲] L. Desgranges, *et. al*., *Inorganic Chemistry* **56** (2017) 321.

[3] S. Dudarev, D. N. Manh, and A. Sutton; "Effect of Mott-Hubbard Correlations on the Electronic Structure and Structural Stability of Uranium dioxide"; *Philosophical Magazine* B **75** (1997) 613.

[4] P. Giannozzi, *et. al.*; "Quantum ESPRESSO: A Modular and Open-Source Software Project for Quantum Simulations of Materials"; *Journal of Physics: Condensed Matter* **21** (2009) 395502.

[5] پیامی شبستر، محمود ؛ «اثرات نسبیتی حرکت الکترونها بر هندسه و ساختار الکترونی UO2 در چارچوب DFT+U »؛ مقاله نامه ششمین کنفرانس رشد بلور ایران، ۲۶ آبان ۱۴۰۰، دانشگاه سمنان، صفحه ۴۸.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

نانو ورقه‌های اکسید نیکل به عنوان الکتروکاتالیست فاقد بایندر جهت تجزیه کارآمد آب دریا

همتی کهرادە، خدیجه[1] ؛ مرادلو، عمران[2] ؛ مشفق، علیرضا[1و3*]

[1]دانشکده فیزیك، دانشگاه صنعتی شریف، خیابان آزادی، تهران
[2]دانشکده شیمی، دانشگاه الزهرا (س)، خیابان ده ونک، تهران
[3]پژوهشکده نانو، دانشگاه صنعتی شریف، خیابان آزادی، تهران
*moshfegh@sharif.edu

چکیده

شکافت آب می تواند منجر به ذخیره انرژی در قالب گاز هیدروژن به عنوان یک سوخت پاک برای غلبه بر بحران انرژی شود، اما متاسفانه به دلیل رشد سریع جمعیت، آب شیرین نیز یک منبع کمیاب است. از این رو، جستجو برای یک الکتروکاتالیست کارآمد و قوی، که می تواند منجر به تولید O_2 و H_2 با خلوص بالا از شکافت مستقیم آب دریا شود، بسیار مورد توجه است. در مطالعه حاضر، الکتروکاتالیست تصاعد گاز اکسیژن (OER) مبتنی بر نانو ورقه-های اکسید نیکل که با استفاده از تکنیک مهندسی مورفولوژی به کمک روش هیدروترمال توسعه داده شده است و می تواند منجر به فعالیت بالا برای واکنش تصاعد گاز اکسیژن (OER) در آب دریا شود، گزارش شده است. الکتروکاتالیست فاقد بایندر مبتنی بر نانو ورقه‌های اکسید نیکل با بهره مندی از مکان‌های فعال کاتالیستی، قابلیت انتقال بار الکتریکی مطلوب و همچنین انتشار سریع حباب‌های گاز، فعالیت الکتروکاتالیستی OER فوق العاده‌ای را در جهت شکافت آب شبیه سازی شده دریا (1.0 M KOH+0.5 M NaCl) نشان می دهد؛ به گونه‌ای که برای دستیابی به چگالی جریان 200 میلی آمپر بر سانتی متر مربع تنها مقدار 295 میلی ولت پتانسیل مازاد لازم است، در حالی که برای بستر فوم نیکل به عنوان زیرلایه‌ی اصلی مورد استفاده در این پژوهش، پتانسیل مازاد به مقدار 630 میلی ولت برای دستیابی به چگالی جریانِ یکسان 200 میلی آمپر بر سانتی متر مربع افزایش می یابد. این کشف، به دلیل کارایی بالا، تکنیک سنتز آسان و مقیاس‌پذیر، می‌تواند الکتروکاتالیست‌های غیر گرانبها را برای شکافت کارآمد و پایدار آب دریا گسترش دهد و کاربرد صنعتی مقرون به صرفه‌ای را برای فناوری هیدروژن سبز در مقیاس بزرگ ارائه دهد.

واژه های کلیدی: اکسید نیکل، نانو ورقه‌ها، هیدروترمال، الکترود آند، شکافت الکتروکاتالیستی آب دریا

Nickel oxide nanosheets as a binder-free electrocatalyst for efficient seawater splitting

Hematikahradeh, Khadijeh[1]; Moradlou, Omran[2]; Moshfegh, Alireza[1,3 *]

[1] Department of Physics, Sharif University of Technology, Azadi Avenue, Tehran
[2] Department of Chemistry, Alzahra University, Vanak Village Street, Tehran
[3] Institute for Nanoscience and Nanotechnology, Sharif University of Technology, Azadi Avenue, Tehran
moshfegh@sharif.edu*

Abstract

Water splitting can result in the storage of energy in the form of hydrogen gas as a clean fuel to overcome the energy crisis, but unfortunately, due to rapid population growth, pure water is also a scarce resource. Hence, searching for an efficient and robust catalyst, which can lead to the generation of high purity O2 and H2 from direct seawater splitting, is extremely interesting. In the present study, an oxygen evolution reaction (OER) electrocatalyst based on nickel oxide nano-sheet has been reported, which was developed by morphological engineering technique using the hydrothermal method and can lead to high reactivity for OER in seawater electrolysis. This binder-free electrocatalyst based on nickel oxide nano-sheet benefitting from catalytically active sites, good electrical charge transfer capability as well as the fast release of gas bubbles, shows superb catalytic activity toward seawater splitting, requiring low overpotential of 295 mV to attain current density of 200 mA cm^{-2} in mimic seawater (1.0 M KOH + 0.5 M NaCl), while for the pure nickel foam as the substrate used in this study, the overpotential is increased by 630 mV to achieve the same current density of 200 mA cm^{-2}. This discovery, due to its high efficiency, easy and scalable synthesis technique, could expand the library of non-precious electrocatalysts for efficient and stable seawater splitting, and offer cost-effective industrial applications for large-scale green hydrogen technology.

Keywords: *Nickel oxide, nanosheets, hydrothermal, anode electrode, electrocatalytic seawater splitting*
PACS No. (81)

مقدمه

آمارهای سازمان ملل نشان می‌دهد که جمعیت جهان رو به افزایش است. بر اثر افزایش جمعیت، جامعه جهانی با مشکلات متعددی از جمله مشکلات زیست محیطی، کمبود منابع غذایی و منابع انرژی روبرو خواهد شد[1]. از میان اثرات ناخوشایند حاصل از افزایش جمعیت،

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مسأله‌ی تأمین انرژی در قرن 21 برای دستیابی به استانداردهای مطلوب زندگی، به چالشی بزرگ تبدیل شده است. از سویی دیگر، منابع سوخت‌های فسیلی مانند زغال سنگ، نفت و گاز طبیعی به عنوان اصلی‌ترین منابع تامین انرژی (حدود 85% کل مصرف انرژی)، محدود بوده و قادر به تامین انرژی مورد نیاز جمعیت در سال‌های آینده نیستند [2]. هم‌چنین بر اثر مصرف سوخت‌های فسیلی، میزان گازهای گلخانه‌ای از جمله کربن دی اکسید در هوا افزایش می‌یابد که اثرات تخریبی فراوانی بر محیط زیست اعمال می‌کنند و در یک کلام باعث تغییرات اقلیمی و اکوسیستمی می‌شوند[3]. بنابراین، با توجه به پیامدهای منفی زیست محیطی که در نتیجه‌ی مصرف سوخت‌های فسیلی محدودِ ایجاد می‌شود و با در نظر گرفتن بحران جمعیت وبحران انرژی، چنین نتیجه گیری می‌گردد که جهان بیش از این تحمل آلودگی‌ها را ندارد و زمان آن فرا رسیده است که بشر دنبال جایگزینی مناسب برای منابع سوخت‌های فسیلی باشد. از این رو اهمیت به کارگیری منابع تمیز و تجدیدپذیر به عنوان جایگزینی مناسب و بالقوه برای سوخت‌های فسیلی بیش از پیش نمایان می‌شود. هیدروژن به عنوان یک حامل انرژی پاک، دوستدار محیط زیست و از همه مهمتر با چگالی انرژی بالا (143مگاژول بر کیلوگرم) می‌تواند به عنوان یک رویکرد نوید بخش برای حل بحران انرژی باشد؛ در روش‌های معمول تولید هیدروژن از طریق انجام واکنش تبدیل بخار متان، مقدار زیادی گاز گلخانه‌ای ِکربن دی اکسید آزاد می‌شود. با باز شدن چرخه‌ی گسیلِ کربن دی اکسید، به دام انداختن آن فرآیندی پیچیده با هزینه‌ی بالا است. پس در فرآیند تولید هیدروژن، هدف تولید هیدروژن با بسته ماندن چرخه‌ی گسیل کربن دی اکسید است. آب یکی از مهم‌ترین و غنی‌ترین منابع هیدروژن است و با توجه به افزایش روز افزون استفاده از هیدروژن به عنوان سوخت، روش‌های زیادی برای تولید هیدروژن از آب ابداع شده است که از جمله آن‌ها الکترولیز آب است[4]؛ که اکنون در صنعت از آب و الکترولیت‌های بسیار تمیز و خالص استفاده می‌شود. اما تولید هیدروژن از طریق تجزیه آب خالص، جهان را با بحران کم آبی و بی آبی مواجه خواهد کرد. براساس آمار و ارقام گزارش شده، بسیاری از جوامع با جمعیتی حدود 80 درصد جمعیت فعلیِ جهان در معرض بحران و خطر کم آبی و یا حتی بی آبی قرار دارند. از طرفی آب‌های شور و کم کیفیت موجود در اقیانوس‌ها و دریاها به عنوان یکی از منابع فراوان بر روی کره‌ی زمین می‌توانند در جهت اقدامات اقلیمی و انرژی پاک بطور اقتصادی درستی مورد استفاده قرار بگیرند [5-7]. طی سال‌های اخیر، الکترولیز آب دریا برای تولید هیدروژن پایدار و اصلاحات زیستی به یک فناوری انعطاف پذیر تبدیل شده است [6-8]. الکتروکاتالیست‌ها به عنوان مولفه‌ی کلیدی سیستم‌های الکتروشیمیایی یا الکتروکاتالیستی تجزیه آب دریا محسوب می‌شوند. از این رو توسعه و بکارگیری الکتروکاتالیست‌هایی که از لحاظ اقتصادی مقرون به صرفه هستند و عملکرد مطلوبی را از خود نشان می‌دهند، در این سیستم‌ها از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. یون-های مختلف فلزات واسطه از جمله Fe ، Co، Ni، W و Mn [7] می‌توانند برای توسعه و همچنین بهبود خواص کاتالیستی الکترودهای مورد استفاده در سیستم‌های الکتروکاتالیستی تجزیه آب دریا مورد استفاده قرار بگیرند. در میان این فلزات واسطه، نیکل به علت خواص الکترونیکی مناسب و اثرات هم افزایی موثر و دوام در برابر خوردگی توسط یون‌های کلر موجود در آب دریا، ویژگی‌های سطح ماده را در جهت بروز بهبود خواص الکتروکاتالیستی و ضد خوردگی ایده آل، بطور چشمگیری تغییر می‌دهد [9]. از این رو در این پژوهش الکترود آند با عملکرد مطلوب در جهت نیم واکنش تصاعد گاز اکسیژن (OER) برپایه‌ی نانو ورقه‌های اکسید نیکل جهت بکارگیری در یک سیستم الکتروکاتالیستی پایدار و کارآمد آب دریا تنظیم شده است. برای اینکه تولید سوخت شیمیایی پاک و پایدار از طریق منابع فراوان موجود روی کره زمین مانند آب دریا مناسب بوده و استفاده از آن نیز تداوم داشته باشد، پیشرفت و توسعه ابزارهای کارآمد و پایدار که در عین حال طراحی ساده‌ای داشته باشند، بسیار مورد توجه است. یکی از مزیت‌های تولید هیدروژن با استفاده از تجزیه الکتروکاتالیستی آب دریا نیز سادگی و اقتصادی بودن آن است. به همین دلیل این قابلیت را دارد که در مقیاس جهانی مورد استفاده قرار بگیرد. از این رو در این تحقیق ساختاری پایدار و زیست سازگار با هزینه‌های پایین آماده سازی، به عنوان الکترود آند جهت تجزیه آب دریا و تولید هیدروژن تهیه شد. الکترود مبتنی بر نانو ورقه‌های اکسید نیکل به عنوان نانو ساختارهای دو بعدی که بر روی بستر فوم نیکل رشد داده شده‌اند، به دلیل ایجاد ساختارهای کاملاً رسانا و افزایش سطح موثر بطور قابل ملاحظه، فعالیت کاتالیستی قابل توجهی در راستای نیم واکنش OER برای تجزیه آب دریا از خود نشان می‌دهند.

روش تجربی

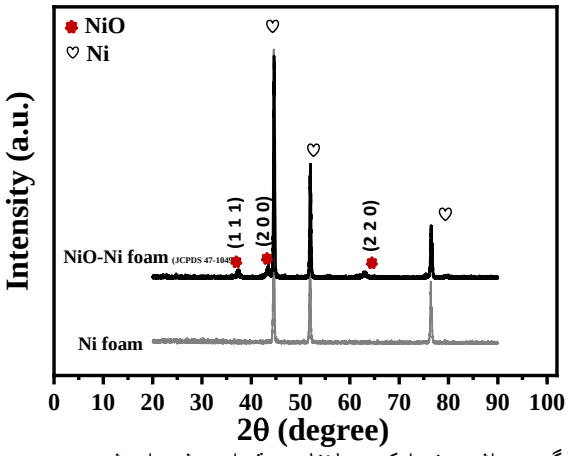
به منظور ایجاد نانو ورقه‌های اکسید نیکل، ابتدا 5 میلی مول از نیکل نیترات 6 آبه به همراه 10 میلی مول پتاسیم پرسولفات در 12 میلی لیتر آب دیونیزه حل شد و به مدت 5 دقیقه از همزن مغناطیسی به منظور تشکیل محلول شفاف استفاده شد. در ادامه فوم نیکل با ابعاد (1cm×3cm) به عنوان بستری برای رشد ورقه های نیکل اکسید، با هیدروکلریک اسید (HCl 37 wt%) به مدت 5 دقیقه تحت حمام فراصوت به منظور حذف لایه‌های NiO سطحی شستشو داده شد و سپس با آب دیونیزه و اتانول خالص هر کدام به مدت 5 دقیقه تحت حمام فراصوت، برای کسب اطمینان از تمیز شدن فوم نیکل شستشو داده شد. فوم نیکل و محلول شفاف به یک تفلون 15 میلی لیتری واقع در اتوکلاو منتقل شدند و به مدت 10 ساعت

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تحت دمای 150 درجه‌ی سانتی‌گراد قرار گرفتند. بعد از پایان فرآیند هیدروترمال و سرد شدن اتوکلاو، رنگ فوم نیکل از حالت براق فلزی به رنگ سبز روشن تغییر کرد که دلالت بر تشکیل لایه‌ی NiO است. لایه‌ی نازکِ سبز رنگِ تشکیل شده روی فوم نیکل چندین بار با آب دیونیزه و اتانول تحت حمام فراصوت شستشو داده شد (با توجه به برهمکنش قوی بین فوم نیکل و لایه‌ی سبز رنگِ تشکیل شده روی آن، طی فرآیند شستشو تحت حمام فراصوت فیلم تشکیل شده از فوم نیکل جدا نشد). فوم نیکل با لایه‌ی سبز تشکیل شده روی سطح آن، در دمای 80 درجه‌ی سانتی‌گراد به مدت 6 ساعت خشک شد و در پایان تحت فضای آرگون به مدت 1 ساعت در دمای 450 درجه‌ی سانتی‌گراد بازپخت شد. در نهایت، نانو ورقه‌های اکسید نیکل رشد داده شده روی فوم مستقیماً به عنوان الکترود آند تحت ارزیابی‌های الکتروشیمیایی در راستای تجزیه آب دریا قرار گرفتند.
است.

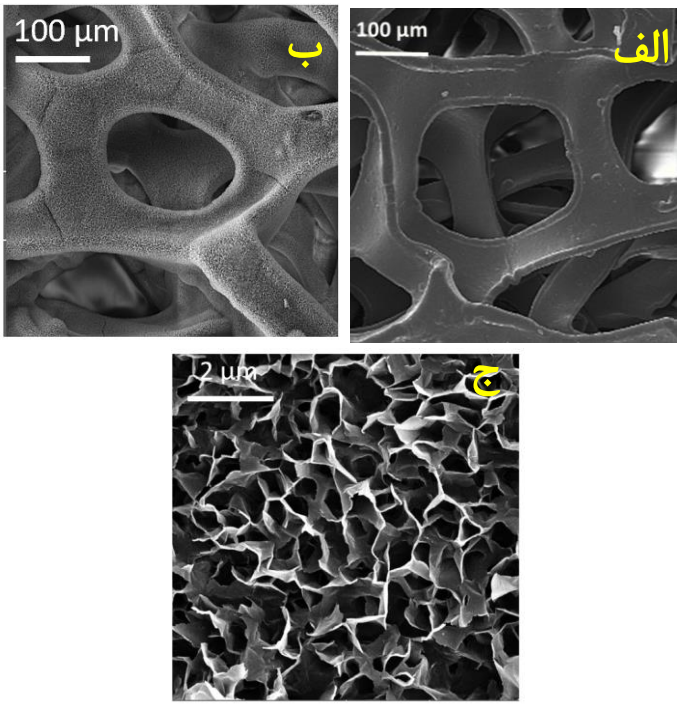
نتایج

فاز نمونه های آماده شده توسط الگوی پراش پرتو ایکس مشخص شد. در شکل1 الگوی پراش پرتو ایکس (XRD) مربوط به آرایه‌ی نانو ورقه‌ها بعد از بازپخت شدن در دمای 450 درجه‌ی سانتی گراد نشان داده شده است. پیک‌های مشاهده شده در زوایای $2\theta=$ 37.21° ، 43.23° و 62.87° را می‌توان به ترتیب به صفحات (111)، (200) و (220) مربوط به ساختار NiO نسبت داد که تغییر فاز به NiO طی فرآیند حرارتی را تایید می کند (JCPDS 47-1049) [9].



شکل1 : الگوی پراش پرتو ایکس ساختار ورقه ای رشد داده شده بر روی بستر فوم نیکل.

مورفولوژی و بافت سطح نمونه‌های تهیه شده به روش هیدروترمال، به کمک تصویربرداری میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی (FE-SEM) مورد بررسی قرار گرفت. تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی از فوم نیکل خالص قبل از هرگونه عملیات حرارتی در شکل2 (الف) نشان می-دهد که فوم تجاری نیکل دارای یک ساختار ماکرو متخلخل سه بعدی با سطح تمیز و هموار است. بعد از فرآیند هیدروترمال و بازپخت، مطابق شکل2 (ب) مشاهده می‌کنیم، اسکلت متخلخل سه بعدی فوم نیکل دست نخورده باقی می ماند و سطح سیم های آن بصورت کاملاً یکنواخت توسط آرایه ای ورقه‌ای از اکسید نیکل با سطح کاملاً صاف که به طور عمود بر هم مستقر شده‌اند؛ پوشیده شده است، شکل2 (ج).

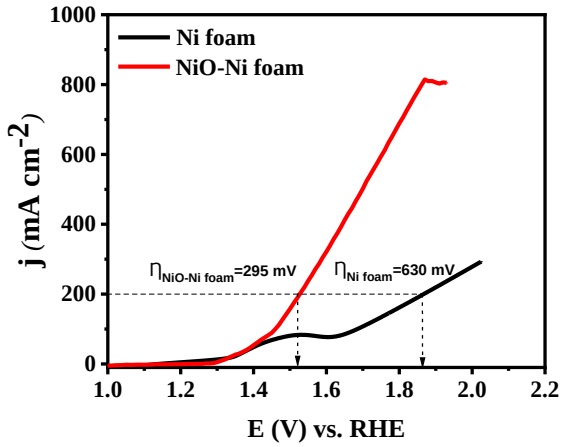


شکل2 : میکرو گراف‌های FE-SEM: (الف) فوم نیکل خالص قبل از هرگونه عملیات، (ب-ج) آرایه ی ورقه‌ای NiO رشد داده شده بر روی فوم نیکل بعد از فرآیند عملیات حرارتی با بزرگنمایی های مختلف.

به منظور ارزیابی فعالیت و عملکردِ الکترود تهیه شده برپایه ی آرایه‌ی نانو ورقه‌های اکسید نیکل بر روی بستر فوم نیکل، در راستای نیم واکنش OER جهت تجزیه الکتروشیمیایی آب شبیه سازی شده دریا (محلول 1.0M KOH+0.5M NaCl)، الکترود تهیه شده در یک سیستم سه الکترودی شامل Ag/AgCl به عنوان الکترود مرجع، مش پلاتین به عنوان الکترود مقابل و نانو ورقه‌های اکسید نیکل از قبل رشد داده شده بر روی فوم نیکل به عنوان الکترود کار قرار گرفتند و آزمون‌های الکتروشیمیایی برای بررسی عملکرد کاتالیستی الکترود شامل آزمون‌های ولتامتری روبشی خطی LSV و طیف سنجی امپدانس الکتروشیمیایی EIS در دمای اتاق انجام شد. برای ارزیابی عملکرد در راستای نیم واکنش آندی OER تکنیک LSV برای الکترود مبتنی بر آرایه‌ی نانو ورقه‌های رشد داده شده روی بستر فوم نیکل و به منظور مقایسه برای بستر فوم نیکل نیز بکار گرفته شد شکل (3). مشاهده می‌شود که الکترود برپایه ی آرایه‌ی نانو ورقه‌های اکسید نیکل (NiO-Ni foam) فعالیت خوبی را در راستای فرآیند تصاعد گاز اکسیژن (OER) از خود نشان می‌دهد به گونه‌ای که برای دستیابی به چگالی جریان 200 میلی آمپر بر سانتی متر مربع تنها مقدار 295 میلی ولت پتانسیل مازاد لازم است، در حالی

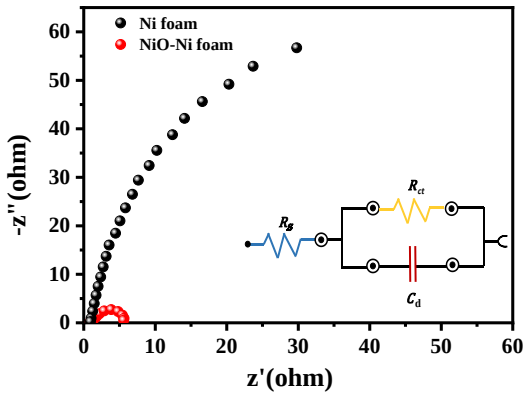
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

که برای بستر فوم نیکل به عنوان زیرلایه‌ی اصلی در این پژوهش پتانسیل مازاد به مقدار 630 میلی ولت برای دستیابی جریانِ یکسانِ 200 میلی آمپر بر سانتی متر مربع افزایش می-یابد.



شکل3 : منحنی‌های پلاریزاسیون OER الکترود برپایه‌ی آرایه‌ی نانو ورقه-های اکسید نیکل (منحنی قرمز) و فوم نیکل خالص (منحنی مشکی).

می‌توان گفت فرآیند هیدروترمال سطحِ صاف و هموارِ فوم نیکل را به آرایه‌ای از ورقه ها مهندسی می کند و بطور قابل ملاحظه ای تعداد سایت های فعال را افزایش می دهد و باعث افزایش فعالیت در راستای OER در مقایسه با فوم نیکل خالص می شود. در واقع با پوشش کامل سطح فوم نیکل با آرایه‌ی نانو ورقه‌ها و اتصال قوی بین نانو ورقه‌ها و زیرلایه، انتقال بار بین الکترود و الکترولیت تسهیل می‌یابد که نتایج آزمون طیف سنجی امپدانس الکتروشیمیایی نیز این ادعا را تایید می‌کند شکل4. مطابق منحنی‌های EIS مقاومت انتقال بار برای الکترود برپایه‌ی آرایه‌ی نانو ورقه‌ها $\sim 4.0\ \Omega$ است که بطور قابل ملاحظه‌ای از مقاومت انتقال بار فوم نیکل خالص کوچکتر است که توانایی انتقال بار آسان و سریع در حضور آرایه‌ی نانو ورقه‌ها را تایید می‌کند.



شکل4 : طیف سنجی الکتروشیمیایی امپدانس، منحنی‌های نایکویست به ازای پتانسیل مازاد 270 میلی ولت، برای فوم نیکل خالص منحنی (مشکی) و الکترود برپایه ی بر آرایه ورقه‌ای اکسید نیکل در آب دریا منحنی (قرمز) و مدار معادل آن.

نتیجه گیری

در این پژوهش الکتروکاتالیست نانوساختار برپایه‌ی نیکل شامل نانو ورقه‌های اکسید نیکل در راستای نیم واکنش آندی OER در آب دریا با فعالیت مطلوب توسعه داده شد. مشارکت سطح موثر بالا با سایت‌های فعال فراوان ناشی از نانوساختار ورقه ای در ترکیب با بهبود فعالیت ذاتی هر سایت فعال، و همچنین توانایی انتقال بار کارآمد ناشی از رسانایی خوب ، باعث افزایش عملکرد و فعالیت کاتالیست توسعه یافته در راستای نیم واکنش آندی OER در آب دریا می شود. کار انجام شده در این پژوهش نه تنها امکان استفاده از کاتالیست‌های فلزات غیر نجیب برای تولید سوخت های هیدروژن و اکسیژن از آب شور دریا را مطرح می کند، بلکه رویکردی موثر برای طراحی منطقی معماری‌های سلسله مراتبی سه بعدی به منظور استفاده در حوزه تبدیل و ذخیره انرژی ارائه می دهد.

مرجع‌ها

[1] R. van de Krol and M. Grätzel, “Photoelectrochemical Hydrogen Production”, *Springer* (2012).

[2] M. Gratzel, “Photoelectrochemical Cells”, *Nature* **414**, (2001) 338-344.

[3] Intergovermental panel on climate change (IPCC) Sixth Assessment Report (AR6), which will be completed in 2022.

[4] The Future of Hydrogen, International Energy Agency, 2019.

[5] Shiklomanov, Igor A; “World freshwater resources. Water in crisis: a guide to the world’s fresh water resources”; *Clim. Change* **45** (1993) 379-382.

[6] Tong, W., Forster, M., Dionigi, F., Dresp, S., Sadeghi Erami, R., Strasser, P., ... & Farràs, P; “Electrolysis of low-grade and saline surface water”; *Nature Energy* **5(5)**, (2020) 367-377.

[7] Khatun, S., Hirani, H., & Roy, P.; “Seawater electrocatalysis: activity and selectivity”; *Journal of Materials Chemistry A*, **9(1)**, (2021) 74-86.

[8] Dresp, S., Dionigi, F., Klingenhof, M., & Strasser, P; “Direct electrolytic splitting of seawater: opportunities and challenges”; *ACS Energy Letters*, **4(4)**, (2019) 933-942.

[9] Vij, V., Sultan, S., Harzandi, A. M., Meena, A., Tiwari, J. N., Lee, W. G., ... & Kim, K. S; “Nickel-based electrocatalysts for energy-related applications: oxygen reduction, oxygen evolution, and hydrogen evolution reactions” *ACS Catalysis* **7(10),** (2017) 7196-7225.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بهبود عملکرد الکتروکاتالیزوری نانوصفحات MoS_2 با استفاده از عملیات پلاسمایی برای تولید هیدروژن از تجزیه آب

خطیبی، علی[۱] ؛ مشفق، علیرضا[۱و۲*]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شریف، خیابان آزادی، تهران، ایران، ۹۱۶۱-۱۱۱۵۵

[۲] پژوهشکده علوم و فناوری نانو، دانشگاه صنعتی شریف، خیابان آزادی، تهران، ایران، ۸۹۶۹۴-۱۴۵۸۸

• نویسنده مسئول (moshfegh@sharif.edu)

چکیده

در این پژوهش، نانوصفحات دی سولفید مولیبدن (MoS_2) با استفاده از روش هیدروترمال به صورت مستقیم بر روی زیرلایه های گرافیتی رشد داده شدند. نتایج میکروسکوپ الکترونی روبشی و طیف سنجی رامان نشان دهنده تشکیل ساختارهای گلبرگی شکل با ابعاد ۲ میکرومتر متشکل از نانوصفحات MoS_2 در فاز نیمرسانا این ماده بود. به منظور بهبود واکنش تولید هیدروژن از تجزیه آب در نانوصفحات MoS_2 رشد داده شده، عملیات پلاسمایی در توان ۱۵ وات، فشار ۰/۱ میلی بار و در زمان های مختلفی انجام شد. بررسی فعالیت الکتروکاتالیزوری این نانوصفحات تحت عملیات پلاسما نشان داد، عملکرد آنها در واکنش الکتروکاتالیزوری تولید هیدروژن بویژه در چگالی جریان های بالا بهبود بخشیده شد. بر اساس تحلیل نتایج بدست آمده، نمونه تحت عملیات پلاسما به مدت ۱۰ دقیقه با پتانسیل مازاد ۵۸۰ mV در چگالی جریان نسبتا بالای ۱۰۰ mA/cm^2 و شیب تافل ۱۴۵ mV/dec بهترین کارایی را نسبت به نمونه های دیگر از خود نشان داد.

واژه های کلیدی: *دی سولفید مولیبدن،الکتروکاتالیزور، واکنش تولید هیدروژن، عملیات پلاسما*

Improving the electrocatalytic performance of plasma treated MoS_2 nanosheets for hydrogen generation from water splitting

Khatibi, Ali[1]; Moshfegh, Alireza[1,2]

[1] *Department of Physics, Sharif University of Technology, Tehran, Iran, 11155-9161*
[2] *Institute for Nanoscience and Nanotechnology, Sharif University of Technology, Tehran, Iran, 14588-89694*

Abstract

In this study, MoS_2 nanosheets were grown directly on graphite substrates using the hydrothermal growth method. Scanning Electron Microscopy and Raman Spectroscopy showed the formation of flower-like structures with almost two micrometer diameters consisting of MoS_2 nanosheets in the semiconductor phase. In order to improve the hydrogen evolution reaction from water splitting in the MoS_2 nanosheets, plasma treatment was performed at a power of 15 watts, a pressure of 0.1 mbar, and at different times. Examination of the electrocatalytic activity of these nanosheets under plasma operation showed that their performance in the electrocatalytic reaction of hydrogen production was improved, especially at high current densities. Based on the analysis of the obtained results, the treated sample with plasma treatment for 10 minutes with an Overpotential of 580 mV in the relatively high current density of 100 mA/cm^2 and a Tofel slope of 145 mV/dec showed the best performance compared to other samples.

***Keywords**: Molybdenum disulfide, Electrocatalyst, Hydrogen Evolution Reaction, Plasma treatment*

PACS No. 52, 82, 82

مقدمه

در حال حاظر کمبود انرژی و آلودگی زیست محیطی ناشی از بهره برداری بیش از حد سوخت های فسیلی، مسئله ذخیره انرژی پایدار را در کانون توجه صنایع مرتبط با انرژی و اولویت های پژوهشی قرار داده است[۱]. بسیاری از فن‌آوری‌های انرژی جایگزین، به‌ویژه تجزیه آب، باتری‌های مختلف و ابرخازن‌ها، به

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

دلیل پتانسیل عظیم و مزایای متعدد بویژه بازدهی بالا، تجدیدپذیری، هزینه کم، سازگاری با محیطزیست و غیره به طور گسترده مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. در حال حاظر تجزیه الکتروشیمیایی آب از واکنش تولید هیدروژن از طریق الکتروکاتالیزور ها یکی از منابع نویدبخش انرژی تجدید پذیر است که به عنوان جایگزینی پاک برای سوخت های فسیلی در نظر گرفته می شود. فلزات نجیب همچون پلاتین و پالادیم که امروزه به عنوان کاتالیزورهای موثری برای تولید هیدروژن شناخته شده هستند، به دلیل کمبود این مواد و همچنین هزینه بالا برای کاربردهای صنعتی محدود می‌باشند[2]. بنابراین، توسعه کاتالیزورهای کارآمد بدون استفاده از فلزات نجیب برای تولید هیدروژن، می تواند آینده درخشانی را در این زمینه ترسیم کند. در سال های اخیر، در میان انواع کاتالیزورهای بدون فلزات نجیب، دی کاکوژن های فلزات واسطه[I] بویژه MoS_2 جایگاه ویژه ای کسب کرده است[3]. همچون دیگر اعضای خانواده مواد دوبعدی، شاخصه بارز MoS_2 پیوند کووالانسی قوی بین اتم های تشکیل دهنده در صفحه و از طرف دیگر پیوند نسبتا ضعیف واندروالسی در جهت ضخامت این صفحات است که در واقع ساخت لایه های با ضخامت بسیار نازک (در حد تک لایه) از این مواد را با مزایای متعدد در مقایسه با مواد توده ای رایج تضمین می‌کند. هزینه نسبتا پایین، فراوانی، فعالیت کاتالیزوری بالا و پایداری قابل قبول MoS_2 را به یک جایگزین امیدوارکننده برای فلزات نجیب در واکنش های کاتالیزوری تولید هیدروژن تبدیل کرده است. با وجود خواص بی نظیر MoS_2، عملکرد این ماده دوبعدی در واکنش های تولید هیدروژن[II] در هر دو محیط اسیدی و بازی پایین تر از فلزات نجیب مانند پلاتین و آلیاژهای آن است. مطالعات متعدد تئوری و تجربی نشان دهنده فعال بودن لبه های بلوری نانولایه های این ماده نسبت به صفحه پایه[III] آن، در واکنش های تولید هیدروژن است[4]. این در حالی است که سطح پایه بلوری این ماده که در واکنش های کاتالیزوری مشارکت ندارد، بسیار گسترده تر از لبه های بلوری است که در واکنش‌های کاتالیزوری بسیار فعال هستند. از این رو، فعال سازی سطح پایه بلوری MoS_2 به عنوان روشی قدرتمند برای افزایش فعالیت در واکنش های کاتالیزوری تولید هیدروژن در سال ها اخیر بسیار مورد توجه قرار گرفته است. یکی از موثرترین راه های فعال سازی سطح پایه بلوری، مهندسی نقص در ساختار MoS_2 است که تاثیر ویژه‌ای بر عملکرد آنها در فرایند کاتالیزوری تولید هیدروژن دارد[5].

رشد نانوصفحات MoS_2 به روش هیدروترمال

برای رشد مستقیم نانوصفحات MoS_2 از یک زیرلایه گرافیتی (CGP) با ضخامت ۰/۵ میلی متر و ابعاد cm^2 ۳×۵ استفاده شد. به منظور حذف آلودگی‌های احتمالی بر روی سطح، زیرلایه‌های گرافیتی به ترتیب ۱۵ دقیقه در محلول ۲ مولار هیدروکلریک اسید و پنج دقیقه در اتانول و در نهایت پنج دقیقه در آب یون زدوده شده در حمام التراسونیک تحت امواج فراصوت قرار گرفت. پس از اتمام فرآیند شستشو، زیرلایه ها کاملاً خشک شده و آماده برای قرار گیری در اتوکلاو شدند. به منظور آماده سازی محلول پیش ماده فرایند هیدروترمال، ۲۰۰ میلی گرم پودر سدیم مولیبدات و همچنین ۲۰۰ میلی گرم پودر تیواوره در حجم ۵۰ میلی لیتر آب یون زدوده شده به مدت نیم ساعت به هم زده شد. سپس، محلول کاملا شفافی از پیش ماده های مولیبدن و سولفور در یک محفظه تفلونی با حجم ۱۰۰ میلی لیتر قرار داده شد و در ادامه فرایند هیدروترمال پس از جاسازی محفظه تفلونی حاوی پیش ماده ها در یک اتوکلاو با جنس استیل زنگ نزن، در یک کوره با دمای ۲۲۰ درجه سانتی‌گراد و به مدت ۲۰ ساعت انجام شد. در نهایت پس از اتمام فرایند رشد و خنک سازی طبیعی، نمونه های رشد داده شده (MoS_2/CGP) در دمای ۶۰ درجه به مدت ۱۲ ساعت خشک شدند.

عملیات پلاسمایی نانوصفحات MoS_2

به منظور ایجاد نقص در نانوصفحات MoS_2، از یک راکتور پلاسمای کوپل القایی در فشار پایین استفاده شده است. برای جلوگیری از تخریب لایه های MoS_2، پلاسمای ترکیبی گاز آرگون (۸۰٪) و هیدروژن (۲۰٪) در توان پایین ۱۵ وات و فشار ۰/۱ میلی

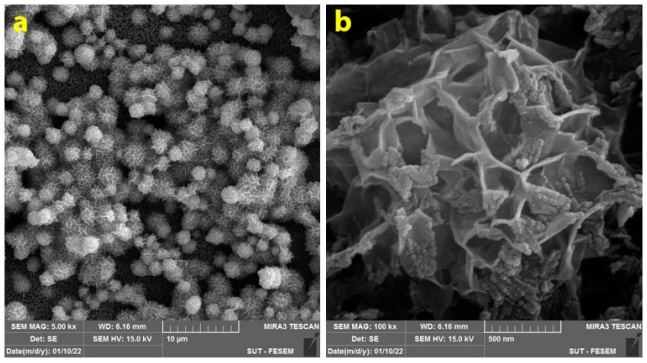
[I] Transition Metal Dichalcogenides
[II] Hydrogen Evolution Reaction
[III] Basal plane

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بار تشکیل شده و اثر پلاسما در زمان های ۱۰، ۲۰ و ۳۰ دقیقه مورد مطالعه قرار گرفت.

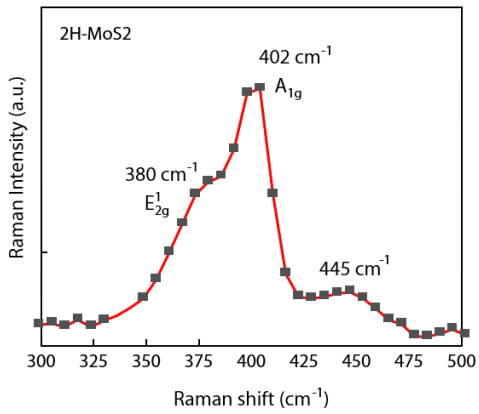
شناسایی ساختار نانوصفحات MoS_2

به منظور بررسی ریخت شناسی لایه‌های رشد داده شده به روش هیدروترمال بر روی زیرلایه های گرافیتی، از میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی[IV] استفاده شد. تصویر مربوط به لایه MoS_2 با دو مقیاس ۱۰ و ۰/۵ میکرومتر به ترتیب در شکل های 1a و 1b نشان داده شده است. همانطور که در شکل مشخص شده است، ساختارهای گلبرگی شکلی به ابعاد ۲ میکرومتر در روی سطح بطور یکنواخت توزیع شده اند که تصویر یکی از این ساختارها در شکل 1b نشان داده شده است. ساختار منحصر به فرد سه بعدی این لایه های نانومقیاس می تواند منجر به بهره‌گیری بیشتر از فعالیت کاتالیزوری لبه ها شود. در واقع این بهبود از طریق افزایش مساحت سطح و تماس بیشتر الکترولیت با سطح ماده و در نتیجه، بهبود انجام واکنش تولید هیدروژن بر روی سطح الکترود می شود.



شکل۱: تصویر FE-SEM از نانوصفحات MoS_2 رشد داده شده به روش هیدروترمال در دمای ۲۲۰ درجه سانتی گراد به مدت ۲۰ ساعت a) با مقیاس ۱۰ میکرومتر، b) با مقیاس ۰/۵ میکرومتر.

دلیل استفاده از دما و زمان بالا در رشد هیدروترمال نمونه ها که به ترتیب ۲۲۰ درجه سانتی گراد و ۲۰ ساعت انتخاب شد، تشکیل نانوصفحات نیمرسانای MoS_2 بود که این موضوع با تحلیل نتایج طیف سنجی رامان نیز تایید شده و همخوانی دارد. همانطور که در شکل ۲ نشان داده شده است، طیف رامان نمونه رشد داده شده با شرایط فوق نشان دهنده دو قله در ۳۸۰ و ۴۰۲ cm^{-1} وجود دارد که مربوط به مدهای ارتعاشی E^1_{2g} و A_{1g} است که به عنوان شناسه اصلی برای فاز نیمرسانای MoS_2 شناخته شده هستند.



شکل۲ : طیف رامان ساختار نانوصفحات MoS_2 با قله های مشخصه فاز نیم-رسانای این ماده (2H).

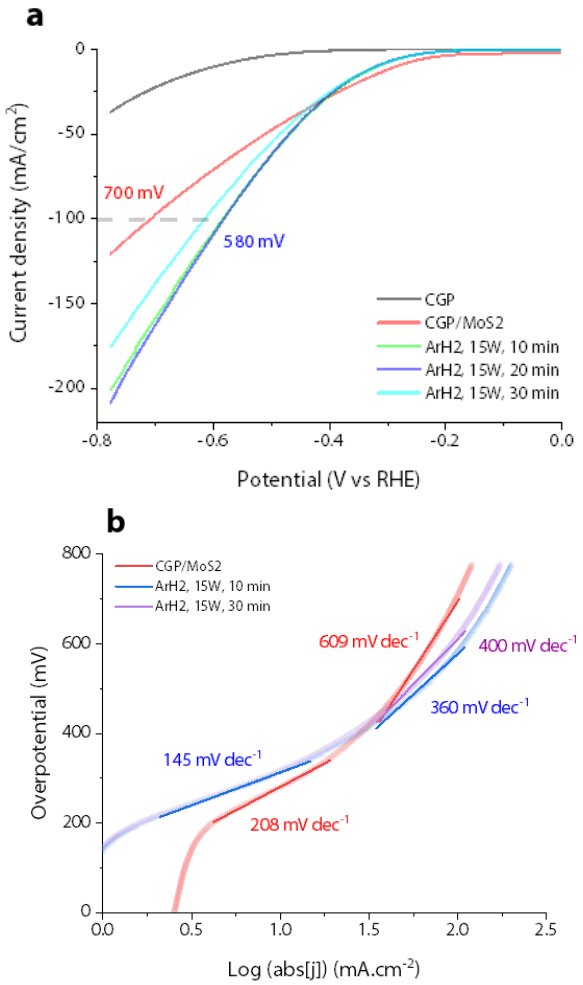
بررسی کارایی الکتروشیمیایی در کاربرد HER

اندازه‌گیری‌های الکتروشیمیایی در این پژوهش با استفاده از یک دستگاه پتانسیواستات مدل PGSTAT 302 در یک سلول الکتروشیمیایی سه‌الکترودی انجام شد. این سلول مجهز به یک الکترود Ag/AgCl (3M KCl) به عنوان الکترود مرجع و یک الکترود میله‌ای پلاتین به عنوان الکترود مقابل[V] می‌باشد. همچنین از محلول ۰/۵ مولار سولفوریک اسید نیز به عنوان الکترولیت استفاده شد. نمونه های لایه نشانی شده کنترل و تحت عملیات با پلاسما نیز به عنوان الکترود کار[VI] به شکل قطعه‌های مربعی با ابعاد ۱×۱ cm^2 آماده شدند. شکل 3a نمودارهای LSV بدست آمده در واکنش HER برای نمونه کنترل یا همان فیلم MoS_2 بر روی زیرلایه گرافیتی و همچنین نمونه های تحت عملیات با استفاده از پلاسما در زمان های ۱۰، ۲۰ و ۳۰ دقیقه نشان داده شده است. اگرچه پتانسیل مازاد نمونه های تحت عملیات با پلاسما در چگالی جریان های کمتر از ۳۰ mA/cm^2 اندکی بیشتر از نمونه کنترل هستند اما پتانسیل مازاد در چگالی جریان های بیشتر از ۳۰ mA/cm^2 انتقالی بیشتر از ۱۰۰ mV را نشان می دهند. در واقع پتانسیل مازاد برای نمونه های کنترل، تحت عملیات ۱۰، ۲۰ و ۳۰ دقیقه به ترتیب ۷۰۰، ۵۸۰، ۵۸۲ و ۶۲۵ میلی ولت بدست آمد.

[IV] Field emission scanning electron microscope (FESEM)

[V] counter electrode (CE)
[VI] working electrode (WE)

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل۳ : a) نمودار LSV b) نمودار ولتاژ بر حسب لگاریتم جریان به منظور محاسبه شیب تافل در دو ناحیه جریان ۱۰ و ۱۰۰ میلی آمپر بر سانتی متر مربع، الکترودهای ساخته شده بر پایه نانوصفحات MoS2 پرازش شده یا استفاده از پلاسمای آرگون-هیدروژن در محلول سولفوریک اسید.

این رفتار گویای قابلیت رانش جریان بالاتر برای محدوده ولتاژ ثابت برای نمونه های تحت عملیات پلاسمایی نسبت به نمونه کنترل است که به وضوح نشان از تاثیر عملیات پلاسمایی بر بهبود خواص الکتروکاتالیزوری نانوصفحات MoS_2 دارد. نمودار تافل استخراج شده از داده های LSV بر اساس رابطه $\log |j(mA/cm^2)|$ بدست آمد (j چگالی جریان) که نتایج آن در شکل 3b ارائه شده است. شیب تافل برای نمونه های کنترل، و نمونه تحت عملیات با پلاسما به مدت ۱۰ و ۳۰ دقیقه در محدوده جریان های چند ده میلی آمپری از مقدار ۲۰۸ به ۱۴۵ mV/dec کاهش پیدا کرد که این افت ولتاژ مازاد نشان دهنده تاثیر مستقیم پلاسما بر بهبود عملکرد الکتروکاتالیزوری نانوصفحات MoS_2 و در نتیجه افزایش تولید بیشتر هیدروژن دارد. بهبود خواص الکتروکاتالیزوری نانوصفحات MoS_2 نتیجه تولید نقص های گوناگون در ساختار این نانوصفحات به واسطه بر همکنش آنها با پلاسما می‌باشد. در واقع برهمکنش گونه‌های متعدد و پرانرژی موجود در پلاسما اعم از یون‌ها، گونه‌های برانگیخته و رادیکال‌ها با نانوصفحات MoS_2 موجب تشکیل نقص‌های ساختاری در این نانوصفحات شده که به عنوان مراکز فعالی برای واکنش های کاتالیزوری تولید هیدروژن عمل می کنند.

نتیجه گیری

در این تحقیق، اثر عملیات پلاسمای آرگون-هیدروژن بر بهبود عملکرد نانوصفحات MoS_2 در فرایند تولید هیدروژن مورد بررسی قرار گرفت. نانوصفحات مورد مطالعه به روش رشد مستقیم هیدروترمال بر روی زیرلایه های گرافیتی بدست آمد. بر اساس نتایج ما عملیات نانوصفحات MoS_2 به مدت۱۰ دقیقه توسط پلاسما می تواند نقشی موثر در بهبود عملکرد کاتالیزوری آنها بویژه در چگالی جریان های بالا در واکنش های تولید هیدروژن داشته باشد. این زمان نسبتا کوتاه در مقایسه با روش های معمول برای کنترل مهندسی نقص در این مواد می تواند نوید بخش پتانسیل بسیار موثر انجام عملیات پلاسمایی در نانوصفحات دوبعدی با هدف افزایش کارایی آنها در کاربردهای الکترو کاتالیزوری باشد.

سپاس گزاری

بدین‌وسیله، نویسندگان از حمایت های مالی معاونت پژوهش و فناوری دانشگاه صنعتی شریف، فدراسیون سرآمدان علمی ایران و صندوق حمایت از پژوهشگران کشور (طرح 940009) تشکر و قدردانی می‌نمایند.

مرجع‌ها

[1] M. Khodabakhshi, Sh. Chen, T. Ye, H. Wu, L. Yang, W. Zhang, H. Chang; *ACS Appl. Mater. Interfaces* **12** (2020) 36268-36276.
[2] Hu, Jue, Lijun Wu, Kurian A. Kuttiyiel, et al. *Journal of the American Chemical Society* **138**, no. 29 (2016): 9294-9300.
[3] Samadi, M., Sarikhani, N., Zirak, M., Zhang, H., Zhang, H. L., & Moshfegh, A. Z. (2018). Nanoscale Horizons, 3(2), 90-204.
[4] Xie, Junfeng, Hao Zhang, Shuang Li, Ruoxing Wang, Xu Sun, Min Zhou, Jingfang Zhou, Xiong Wen Lou, and Yi Xie. *Advanced Materials* **25**, no. 40 (2013): 5807-5813.
[5] Li, Hong, Charlie Tsai, Ai Leen Koh, Lili Cai, Alex W. Contryman, Alex H. Fragapane, Jiheng Zhao et al. *Nature Materials* **15**, no. 1 (2016): 48-53.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

دینامیک درهم‌تنیدگی و وارونی جمعیت در یک سامانه دواتمی در دو کاواک جفت شده با فیبر نوری در حضور محیط کِر و گذارهای دوفوتونی

موسوی، سید علی سینا؛ توسلی، محمد کاظم

گروه اپتیک و لیزر، دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد

چکیده

در این مقاله درهم‌تنیدگی بین دو اتم در دو کاواک مجزا که توسط یک فیبر نوری به هم جفت شده است، با استفاده از سنجه تلاقی بررسی شده، در حالی که گذارها دوفوتونی و محیط کِر هم در نظر گرفته شده است. هر کاواک شامل یک اتم دوترازی و یک میدان تک‌مد است. فیبر نوری عامل ایجاد درهم‌تنیدگی اتم-هاست. نتایج عددی حل دینامیک برهم‌کنش سامانه نشان می‌دهد که اگر ثابت کِر به اندازه کافی بزرگ باشد، درهم‌تنیدگی بین دو اتم، می‌تواند مقدار اولیه خود را بطورتقریبی از نوسانات با دامنه زیاد حفظ کرده، پایداری نسبی ایجاد کند. همچنین، جفت‌شدگی و نامیزانی هم بررسی شده و نشان میدهیم که جفت‌شدگی اتم-میدان متقارن، پایداری مناسب‌تر درهم‌تنیدگی را نتیجه می‌دهد. در نهایت، وارونی جمعیت اتمی در هر کاواک نیز بررسی شده و نشان می‌دهیم که با پارامترهای موجود، این کمیت نیز مشاهده می‌شود و قابل کنترل است.

واژه‌های کلیدی: *جفت‌شدگی کاواک‌ها، درهم‌تنیدگی اتم-اتم، محیط کِر، وارونی جمعیت.*

Entanglement dynamics and population inversion of a two-atom system in two cavities coupled with optical fiber in the presence of Kerr medium and two-photon transition

Musavi, Sayed Ali Sina; Tavassoly, Mohammad Kazem

Laser and Optics Group, Faculty of Physics, Yazd University

Abstract

In this paper, the entanglement between two atoms in two distinct cavities which are connected by an optical fiber, is investigated by using the concurrence, while two-photon transitions and Kerr medium are considered. Each cavity contains a two-level atom and a single-mode quantized field. Optical fiber causes entanglement of atoms. Numerical results of the dynamical solution of the interacting system show that, if the Kerr medium is enough large, the initial values of entanglement between the two atoms can be approximately protected from the large amplitude of vibrations, so that relative stability is created. Also, atom-field coupling and detuning effects are investigated and it is shown that symmetric coupling results in more stability of entanglement. Eventually, atomic population inversion is investigated in each cavity and we show that with the available parameters, this quantity is also controllable.

***Keywords**: Atom-atom entanglement, Atomic inversion, Coupled cavities, Kerr medium.*
PACS No. 32

مقدمه

درهم‌تنیدگی، به عنوان متمایزترین وجه بین فیزیک کلاسیک و فیزیک کوانتومی، جزء جدایی‌ناپذیر محاسبات کوانتومی است و نقش محوری در زمینه ارتباطات و رمزنگاری کوانتومی ایفا می‌کند [۱]. این پدیده در قلب فناوری‌های اطلاعات کوانتومی قرار گرفته است [۲]. مدل جینز-کامینگز به عنوان توصیف‌کننده برهم‌کنش یک اتم دوترازی با یک میدان کوانتیده تک‌مد، یکی از ساده‌ترین روش‌های تولید درهم‌تنیدگی به شمار می‌رود [۳]. از جمله مهم‌ترین مزایای این مدل می‌توان به قابل تعمیم بودن آن برای سامانه‌های پیچیده‌تر کوانتومی اشاره کرد. به همین دلیل در چند دهه اخیر توجه بسیاری از پژوهشگران حوزه‌های مختلف فیزیک بویژه اپتیک کوانتومی و اطلاعات کوانتومی را به خود جلب کرده است. در این راستا، در مرجع [٤] تحول زمانی درهم‌تنیدگی در سامانه‌ای متشکل از برهم‌کنش یک اتم دوترازی در برهم‌کنش با

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

یک میدان کوانتیده تک‌مد با جفت‌شدگی وابسته به شدت در غیاب تشدید مورد بررسی قرار گرفته است. یو و ابرلی دینامیک درهم‌تنیدگی سامانه‌ای متشکل از دو کیوبیت جدا از هم را، که هر کدام با میدان متناظر خود در فضای تک‌برانگیختگی برهم‌کنش می‌کنند، مورد بررسی قرار دادند [۵]. نویسندگان نشان دادند که با در نظر گرفتن حالت‌های بل جزئی به عنوان حالت اولیه سامانه، مرگ و سپس احیای درهم‌تنیدگی به خوبی قابل مشاهده است. ما در این مقاله با معرفی مدل جدیدی از یک سامانه برهم‌کنشی اتم–میدان، با استفاده از سنجه تلاقی درهم‌تنیدگی اتم–اتم و وارونی جمعیت اتمی را محاسبه کرده و اثرات محیط کر، جفت‌شدگی اتم–میدان و نامیزانی را روی آنها بررسی کرده‌ایم.

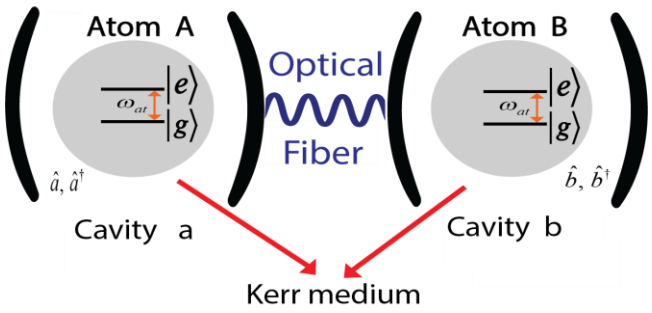
مدل سامانه و روابط پایه

سامانه ما شامل دو اتم دوترازی است که هر کدام از آن‌ها در یک کاواک مجزا قرار دارد. کاواک‌ها با یک فیبر نوری به هم مرتبط هستند. در این سامانه، هر اتم با میدان کوانتیده کاواک خود بواسطه گذار دوفوتونی و در حضور محیط کر برهم‌کنش می‌کنند. لازم به ذکر است که اتم‌های موجود در دو کاواک هیچ برهم‌کنش مستقیمی با هم ندارند. که $\hat{H}_0$ هامیلتونی آزاد و $\hat{H}_{\rm int}$ هامیلتونی برهم‌کنش سامانه به صورت زیر تعریف شده است:

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2}\omega_a\hat{\sigma}_z^A + \frac{1}{2}\omega_a\hat{\sigma}_z^B + \omega_c\hat{a}^\dagger\hat{a} + \omega_c\hat{b}^\dagger\hat{b}, \qquad (۱)$$

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\rm int} =& g_a\left(\hat{a}^2\hat{\sigma}_+^A + \hat{a}^{\dagger 2}\hat{\sigma}_-^A\right)\\ &+ g_b\left(\hat{b}^2\hat{\sigma}_+^B + \hat{b}^{\dagger 2}\hat{\sigma}_-^B\right)\\ &+ J\left(\hat{a}^\dagger\hat{b} + \hat{a}\hat{b}^\dagger\right) + \chi\left(\hat{a}^{\dagger 2}\hat{a}^2 + \hat{b}^{\dagger 2}\hat{b}^2\right),\end{aligned} \qquad (۲)$$

که در آن $\hat{a},\hat{b}(\hat{a}^\dagger,\hat{b}^\dagger)$ عملگرهای بوزونی نابودی (آفرینش) مربوط به میدان کاواک، $\hat{\sigma}_+^A,\hat{\sigma}_+^B(\hat{\sigma}_-^A,\hat{\sigma}_-^B)$ عملگرهای بالابرنده (پائین‌آورنده) اتمی، $\hat{\sigma}_z^A\hat{\sigma}_z^B$ عملگر وارونی جمعیت اتم $A(B)$، ω_c بسامد هر دو مد میدان کاواک‌ها، ω_a بسامد گذار اتم‌های دوترازی، χ ضریب محیط کر، $g_a(g_b)$ ثابت جفت‌شدگی بین اتم $A(B)$ و مد میدان کاواک $a(b)$، و J ضریب جفت‌شدگی بین مدهای فوتونی در دو کاواک است.



شکل۱: دو کاواک اپتیکی تک‌مد که هر کدام شامل یک اتم دوترازی و با یک فیبر نوری به یکدیگر جفت شده‌اند.

کت حالت اولیه و کت حالت وابسته به زمان سامانه کلی مورد نظر را به ترتیب به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\begin{aligned}|\psi(0)\rangle &= \sin(\theta)|0,1,e,g\rangle + \cos(\theta)|0,1,g,e\rangle\\ |\psi(t)\rangle &= c_1(t)|0,1,e,g\rangle + c_2(t)|0,1,g,e\rangle\\ &+ c_3(t)|1,0,e,g\rangle + c_4(t)|1,0,g,e\rangle\\ &+ c_5(t)|2,1,g,g\rangle + c_6(t)|1,2,g,g\rangle\\ &+ c_7(t)|0,3,g,g\rangle + c_8(t)|3,0,g,g\rangle,\end{aligned} \qquad (۳)$$

خوشبختانه با حالت اولیه در نظر گرفته شده و دینامیک سامانه که با هامیلتونی (۱) و (۲) معرفی شد، حالت کلی سامانه با پایه‌های داده شده بسته می‌شود. لذا، با استفاده از معادله شرودینگر وابسته به زمان، به هشت معادله دیفرانسیل جفت‌شده زیر می‌رسیم:

$$\dot{c}_1(\tau) = -\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\omega_c}{g_a}c_1(\tau) + \frac{J}{g_a}c_3(\tau) + \sqrt{2}c_5(\tau)\right)$$

$$\dot{c}_2(\tau) = -\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\omega_c}{g_a}c_2(\tau) + \frac{J}{g_a}c_4(\tau) + \sqrt{6}\,\frac{g_b}{g_a}c_7(\tau)\right)$$

$$\dot{c}_3(\tau) = -\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\omega_c}{g_a}c_3(\tau) + \frac{J}{g_a}c_1(\tau) + \sqrt{6}c_8(\tau)\right)$$

$$\dot{c}_4(\tau) = -\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\omega_c}{g_a}c_4(\tau) + \frac{J}{g_a}c_2(\tau) + \sqrt{2}\,\frac{g_b}{g_a}c_6(\tau)\right)$$

$$\begin{aligned}\dot{c}_5(\tau) = -\frac{i}{\hbar}\Bigg(&3\frac{\omega_c}{g_a}c_5(\tau) - \frac{\omega_a}{g_a}c_5(\tau) + 2\frac{J}{g_a}c_6(\tau)\\ &+\sqrt{3}\frac{J}{g_a}c_8(\tau) + 2\frac{\chi}{g_a}c_5(\tau) + \sqrt{2}c_1(\tau)\Bigg)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\dot{c}_6(\tau) = -\frac{i}{\hbar}\Bigg(&3\frac{\omega_c}{g_a}c_6(\tau) - \frac{\omega_a}{g_a}c_6(\tau) + 2\frac{J}{g_a}c_5(\tau)\\ &+\sqrt{3}\frac{J}{g_a}c_7(\tau) + 2\frac{\chi}{g_a}c_6(\tau) + \sqrt{2}\,\frac{g_b}{g_a}c_4(\tau)\Bigg)\end{aligned}$$

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$$\dot{c}_7(\tau)=-\frac{i}{\hbar}\left(3\frac{\omega_c}{g_a}c_7(\tau)-\frac{\omega_a}{g_a}c_7(\tau)+\sqrt{3}\frac{J}{g_a}c_6(\tau)\right.$$
$$\left.+6\frac{\chi}{g_a}c_7(\tau)+\sqrt{6}\frac{g_b}{g_a}c_2(\tau)\right)$$
$$\dot{c}_8(\tau)=-\frac{i}{\hbar}\left(3\frac{\omega_c}{g_a}c_8(\tau)-\frac{\omega_a}{g_a}c_8(\tau)+\sqrt{3}\frac{J}{g_a}c_5(\tau)\right.$$
$$\left.+6\frac{\chi}{g_a}c_8(\tau)+\sqrt{6}c_3(\tau)\right), \qquad (٤)$$

جهت سهولت در این روابط، $(\tau=g_a t)$ زمان مقیاس‌شده در نظر گرفته شده است. بنابراین، از این به بعد نیز از پارامترهای نسبی تعریف شده زیر $\Omega_c=\frac{\omega_c}{g_a},\Omega_a=\frac{\omega_a}{g_a},G=\frac{J}{g_a},K=\frac{\chi}{g_a}$ استفاده می‌کنیم. ضرایب دامنه احتمال در رابطه (٤) را به‌صورت تحلیلی بدست آوردیم. ماتریس چگالی سامانه کل را با استفاده از $|\psi(\tau)\rangle$ به صورت زیر

$$\hat{\rho}=|\psi(\tau)\rangle\langle\psi(\tau)|, \qquad (٥)$$

و ماتریس چگالی کاهش یافته اتم-اتم را با ردگیری مناسب از رابطه (٥) به صورت زیر بدست می‌آوریم:

$$\rho_{aa}=\begin{bmatrix}0&0&0&0\\0&|c_3|^2+|c_1|^2&c_3c_4^*+c_1c_2^*&0\\0&c_4c_3^*+c_2c_1^*&|c_2|^2+|c_4|^2&0\\0&0&0&\sum_{i=5}^{8}|c_i|^2\end{bmatrix}, \qquad (٦)$$

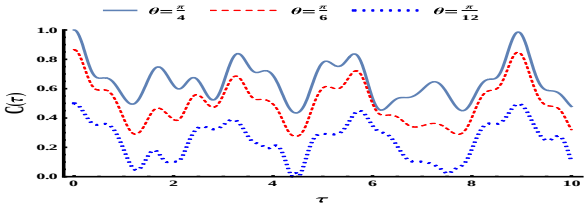
سنجه تلاقی با رابطه زیر بیان می‌شود:

$$C(t)=Max\left(0,\sqrt{\lambda_1}-\sqrt{\lambda_2}-\sqrt{\lambda_3}-\sqrt{\lambda_4}\right), \qquad (٧)$$

که در آن، $\lambda_i(i=1,2,3,4)$ ویژه‌مقادیر ماتریس زیر

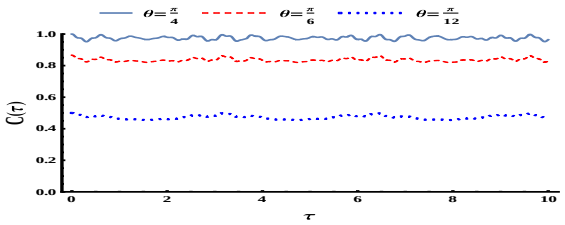
$$\hat{\rho}_{aa}\left(\hat{\sigma}_y\otimes\hat{\sigma}_y\right)\hat{\rho}_{aa}^*\left(\hat{\sigma}_y\otimes\hat{\sigma}_y\right), \qquad (٨)$$

هستند که به‌ترتیب کاهشی نوشته شده‌اند و $\hat{\sigma}_y$ یکی از ماتریس‌های پاولی است. نمودارهای تلاقی ناشی از درهم‌تنیدگی اتم-اتم را برحسب زمان مقیاس شده (τ) رسم شده است.



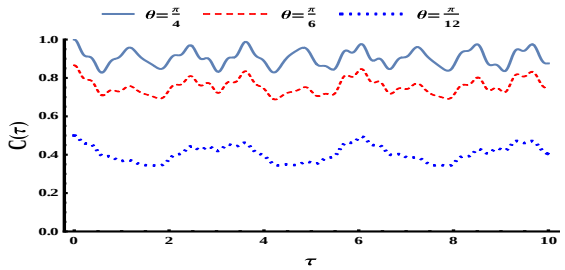
شکل۲: درهم‌تنیدگی اتم-اتم در صورتی که،

$\Omega_c=\Omega_a=0.5;G=1;K=1;g_b=g_a$.



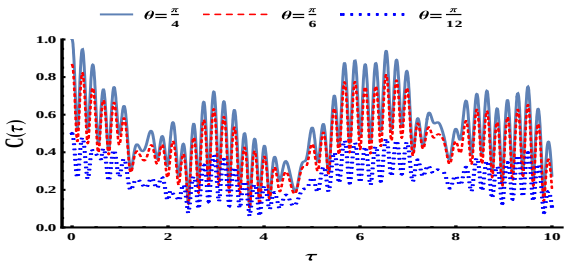
شکل۳: درهم‌تنیدگی اتم-اتم در صورتی که،

$\Omega_c=\Omega_a=0.5;G=1;K=5;g_b=g_a$.



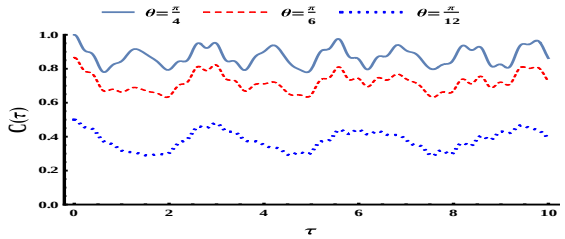
شکل٤: درهم‌تنیدگی اتم-اتم در صورتی‌که،

$\Omega_c=\Omega_a=0.5;G=1;K=2.5;g_b=g_a$.



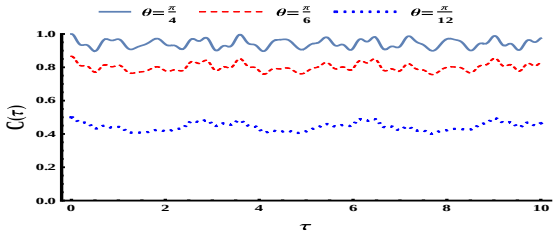
شکل۵: درهم‌تنیدگی اتم-اتم در صورتی که،

$\Omega_c=\Omega_a=0.5;G=1;K=2.5;g_b=5g_a$.



شکل٦: درهم‌تنیدگی اتم-اتم در صورتی که،

$K=2.5;G=1;\Omega_c=0.05;\Omega_a=0.5;g_b=g_a$.



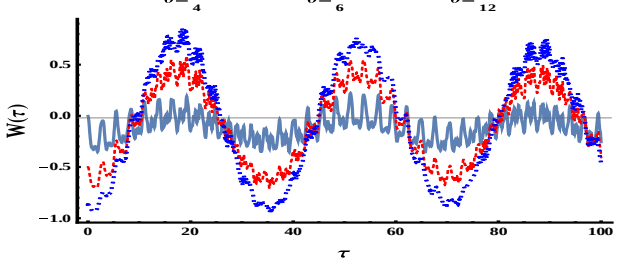
شکل۷: درهم‌تنیدگی اتم-اتم در صورتی که،

$K=2.5;G=1;\Omega_c=1.5;\Omega_a=0.5;g_b=g_a$.

وارونی جمعیت اتم A به صورت زیر،

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$$W_A(\tau)=\langle\psi(\tau)|\sigma_z^A|\psi(\tau)\rangle=|c_1(\tau)|^2-|c_2(\tau)|^2+|c_3(\tau)|^2 \\ -|c_4(\tau)|^2-|c_5(\tau)|^2-|c_6(\tau)|^2-|c_7(\tau)|^2-|c_8(\tau)|^2 \quad (۹)$$

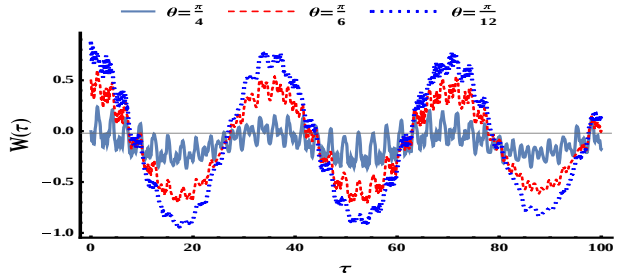


شکل۸: وارونی جمعیت اتم A در صورتی که،

$K=2.5;\ G=1;\ \Omega_c=0.05;\ \Omega_a=0.5;\ g_b=g_a$.

و برای اتم B به شرح زیر بدست می‌آید:

$$W_B(\tau)=\langle\psi(\tau)|\sigma_z^B|\psi(\tau)\rangle=-|c_1(\tau)|^2+|c_2(\tau)|^2-|c_3(\tau)|^2 \\ +|c_4(\tau)|^2-|c_5(\tau)|^2-|c_6(\tau)|^2-|c_7(\tau)|^2-|c_8(\tau)|^2 \quad (۱۰)$$



شکل۹: وارونی جمعیت اتم B در صورتی که،

$K=2.5;\ G=1;\ \Omega_c=0.05;\ \Omega_a=0.5;\ g_b=g_a$.

تجزیه و تحلیل محاسبات و نتیجه‌گیری

در این بخش، نتایج عددی ارائه شده را مورد تجزیه و تحلیل قرار می‌دهیم. لازم به ذکر است که هر چند ما در این مقاله، از هر بحث فقط دو منحنی را ارائه کرده‌ایم، اما منحنی‌های متعددی رسم کرده‌ایم و بنابراین، نتایج کلی‌ای که در اینجا ارائه می‌شود، مبتنی بر یک جمع‌بندی حاصل از تکرار محاسبات عددی با پارامترهای متعدد است. همه نمودارها به ازای زوایای متفاوت $\left(\frac{\pi}{4},\frac{\pi}{6},\frac{\pi}{12}\right)$ رسم شده که با توجه به رابطه (۳) حاکی از لحاظ کردن شرایط اولیه اتمی متفاوت است. اثر محیط کِر در شکل‌های ۲ و ۳ به ازای $K=1$ و $K=5$ و سه پارامتر دیگر یکسان، مورد بررسی قرار گرفته است. بوضوح دیده می‌شود که با افزایش اثر کِر، دینامیک درهم‌تنیدگی بین اتم-اتم در مقدار اولیه خود، و حتی در بیشترین مقدار یعنی ۱، باقی می‌ماند. علاوه بر این دست‌یابی به مقدار شبه‌پایدار درهم‌تنیدگی از نکات مثبت این نمودار است که بلحاظ کاربردی از اهمیت ویژه‌ای برخورداراست. همچنین، بیشترین درهم‌تنیدگی به ازای زاویه $\frac{\pi}{4}$ بدست می‌آید (حالت اولیه با بیشترین در هم‌تنیدگی).

اثر جفت‌شدگی در شکل‌های ٤ و ٥ به ازای $g_b=g_a$ (اصطلاحا متقارن) و $g_b=5g_a$ (اصطلاحا نامتقارن) مورد بررسی قرار گرفته است. پیداست که در حالت متقارن وضعیت درهم‌تنیدگی مطلوب‌تر و پایداری بهتری دارد.

اثر نامیزانی در شکل‌های ٦ و ٧ به ازای $\omega_c=0.1\omega_a$ و $\omega_c=3\omega_a$ که نشان می‌دهد با افزایش نامیزانی درهم‌تنیدگی پایداری بهتری داریم. در همه موارد بالا، نمودار مربوط به شرط اولیه با $\left(\frac{\pi}{12}\right)\frac{\pi}{4}$ نسبت به بقیه موارد در وضعیت مطلوب (نامطلوب) تری است که چندان هم دور از انتظار نیست، چرا که این زاویه‌ها بیشترین (کمترین) مقدار درهم‌تنیدگی اولیه (قبل از وقوع برهمکنش) را می‌دهد. وارونی جمعیت اتم A در شکل ۸ مورد بررسی قرار گرفته است که نشان می‌دهد به ازای زوایای متفاوت از صفر یا یک مقدار منفی شروع می‌شود، اما سپس بین مقادیر مثبت و منفی نوسان می‌کند. وارونی جمعیت اتم B در شکل ۹ مورد بررسی قرار گرفته است، که نشان می‌دهد به ازای زوایای متفاوت برعکس اتم A از صفر و مقادیر مثبت شروع به نوسان نموده اما سپس بین مقادیر مثبت و منفی نوسان می‌کند. نکته قابل توجه این است که برخلاف نمودارهای درهم‌تنیدگی، شرط اولیه $\left(\frac{\pi}{12}\right)\frac{\pi}{4}$ در این نمودار کمترین (بیشترین) مقدار وارونی جمعیت را دارد.

مرجع‌ها

[1] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, Quantum Computation and Quantum Information, Cambrige University Press, Cambrige, (2000).
[2] B. Sun, M. S. Chapman, and L. You, Phys. Rev. A **69** (2004) 042316.
[3] M. J. Faghihi and M. K. Tavassoly, *J. Phys. B. At. Mol.* **45** (2012) 035502.
[4] A. S. Obada, H. A. Hessian and A. B. A. Mohamed, *J. Phys. B. At. Mol. Opt.* **41** (2008) 135503.
[5] Y. Yang, Y. Liu, J. Lu and L. Zhou, *Commun. Theor. Phys.* **73** (2021) 025101.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مطالعه پاسخ اپتیکی غیرخطی در روغن‌های خوراکی با بهره‌گیری از روش مدولاسیون خود فاز فضایی

حسن، امیر نامق[۱]؛ حداد، محمد علی[۱،۲]؛ بهجت، عباس[۱،۲]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد، صفائیه، بلوار دانشگاه، یزد، صندوق پستی:۷۴۱-۸۹۱۹۵

[۲] گروه پژوهشی فوتونیک، آزمایشگاه تحقیقاتی بینابنگاری لیزری، دانشگاه یزد، صفائیه، بلوار دانشگاه، یزد، صندوق پستی: ۷۴۱-۸۹۱۹۵

چکیده

در سال‌های اخیر، بررسی خواص اپتیک غیرخطی مواد مختلف به عنوان ابزاری برای اصالت‌سنجی آنها پیشنهاد شده‌است. استفاده از روغن‌های گیاهی ارگانیک و بکر به دلیل خواص منحصر به فرد غذایی و درمانی، به طور فزاینده‌ای مورد توجه قرار گرفته‌اند. از این رو، اصالت‌سنجی این نوع مواد با استفاده از روش‌های گوناگون، از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. در این مطالعه، برای اولین بار بررسی خواص اپتیک غیرخطی سه روغن گیاهی پرطرفدار روغن کنجد، روغن هسته آلوبالو و روغن هسته آووکادو با استفاده از روش مدولاسیون خود فاز فضایی مورد بررسی قرار گرفته‌اند. با بهره‌گیری از لیزر پیوسته Nd-YAG در طول موج ۴۰۵ nm رفتار اپتیک غیرخطی این مواد گزارش می‌شود. نتایج حاکی از آن است که مقادیر تجربی ضریب شکست غیرخطی و پذیرفتاری الکتریکی غیرخطی این مواد به ترتیب در مرتبه cm^2/W 10^{-6} و m^2/V^2 10^{-9} اندازه‌گیری می‌شوند.

واژه‌های کلیدی: *مدولاسیون خود فاز فضایی، روغن‌های گیاهی، ضریب شکست غیرخطی، پذیرفتاری الکتریکی غیرخطی.*

Study of nonlinear optical response in edible oils using Spatial Self-Phase Modulation (SSPM) technique

Hassan, Amir Namiq[1]; Haddad, Mohammad Ali[1, 2]; Behjat, Abbas[1, 2]

[1]*Department of Physics, Yazd University, Yazd, Iran, PO Box 89195-741*
[2]*Photonic Research Group, Laser Spectroscopy Research Laboratory, Yazd University, Yazd, Iran, PO Box 89195-741*

Abstract

The study of nonlinear optical properties of different foods and drinks has been proposed as a tool for verifying their authenticity in recent years. Organic and edible vegetable oils have grown in popularity due to their unique nutritional and therapeutic benefits. As a result, various techniques for determining the authenticity of this type of material have been considered. For this purpose, this paper investigates the nonlinear optical properties of three popular vegetable oils—sesame oil, cherry kernel oil, and avocado kernel oil—using the spatial phase self-modulation (SSPM) technique. The nonlinear optical response of these materials was studied using an Nd-YAG continuous laser at a wavelength of 405 nm. The result indicates that the experimental values of nonlinear refractive index and third-order nonlinear optical susceptibility are in the order of $10^{-6}\,cm^2/W$ and $10^{-9}\,m^2/V^2$, respectively.

***Keywords**: spatial self-phase modulation, edible oils, non-linear refractive index, non-linear electric susceptibility.*

PACS No. 33

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مقدمه

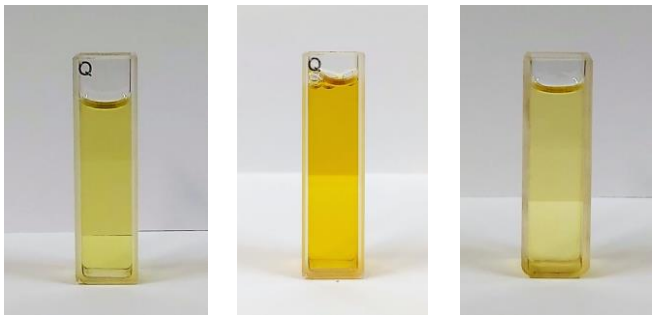
بکارگیری لیزر در سال‌های اخیر بدلیل فراهم‌کردن تابش نوری با شدت میدان تابشی بالا، امکان مطالعه پدیده‌های بدیع مختلفی از جمله رفتار اپتیکی غیرخطی مواد را فراهم کرده‌است [۱]. در سال ۱۹۶۱ میلادی، تولید هارمونیک دوم برگرفته از رفتار اپتیک غیرخطی مواد، برای اولین بار توسط فرانکین و همکارانش به‌صورت تجربی گزارش شد [۲]. نشان داده شده‌است که هنگامی که نمونه‌ای با شدت بالای میدان نوری برانگیخته می‌شود، تغییراتی در خواص اپتیک خود ازجمله تغییر در ضریب شکست و ضریب جذب را تجربه می‌کند. مطالعه و بررسی همه این پدیده‌ها به عنوان اپتیک غیرخطی شناخته می‌شود. خواص اپتیک غیرخطی مواد با ضریب جذب غیرخطی و ضریب شکست غیرخطی نشان داده می‌شود. در حال حاضر، چندین روش برای تعیین خواص اپتیک غیرخطی مواد وجود دارد. از میان آنها می‌توان به روش‌های چرخش بیضی، اندازه‌گیری اعوجاج پرتو، ترکیب دو یا چهار موج، جاروب محوری و مدولاسیون خود فاز فضایی به اشاره داشت[۳].

در دهه‌های اخیر، با توسعه علم و فناوری ابزار جدید الکترونیکی و اپتوالکترونیکی معرفی شده‌اند. در این میان، موادی با رفتار اپتیک غیرخطی، به دلیل کاربردهای متنوع در تولید قطعات اپتیکی و فوتونیکی، مورد توجه محققان و صنعتگران بوده‌اند [٤, ٥]. از سوی دیگر، مطالعه خواص اپتیک غیرخطی مواد، مطالعه اصالت و خلوص نمونه‌ها از جمله مواد غذایی را ممکن ساخته‌است [٦]. نشان داده شده‌است که روغن‌های گیاهی مانند روغن زیتون، روغن پالم، روغن کرچک و برخی روغن‌های خوراکی دیگر پاسخ اپتیک غیرخطی بالایی از خود نشان می‌دهند [٤, ٧].

در این تحقیق برای اولین بار با استفاده از تکنیک مدولاسیون خود فاز فضایی به بررسی و تحقیق رفتار اپتیک غیرخطی سه نوع از روغن‌های گیاهی روغن کنجد، روغن هسته آلوبالو و روغن هسته آووکادو پرداخته شده‌است بدین‌منظور اندازه‌گیری دو پارامتر ضریب شکست غیرخطی (n_2) و پذیرفتاری الکتریکی غیرخطی ($\chi^{(3)}$) نمونه‌های انتخاب‌شده در طول موج نوری $٤٠٥nm$ مورد مطالعه تجربی قرار گرفته شده‌است. نتایج بدست‌آمده نشان می‌دهد که هر سه روغن گیاهی اشاره‌شده رفتار اپتیکی غیرخطی محسوسی را از خود نشان می‌دهند.

آماده‌سازی نمونه‌ها

روغن‌های خوراکی از منابع مختلف گیاهی و حیوانی با استفاده از روش‌های مختلفی بدست می‌آیند. فرآیند حرارتی عمدتاً برای استخراج روغن‌های حیوانی استفاده می‌شود، اما برای استخراج روغن گیاهی، باید تری‌گلیسیریدها از هسته، دانه یا پالپ دانه روغنی که حاوی روغن است جدا شود. تولید روغن گیاهی به روش‌های مختلفی از جمله فرآیندهای مکانیکی، شیمیایی و بیوشیمیایی امکان پذیر است. در این تحقیق با استفاده از روش پرس‌کاری سرد[۱] مکانیکی سه نوع روغن گیاهی کنجد، هسته آلوبالو و هسته آووکادو از دانه‌های روغنی بکر کنجد، هسته آلبالو و هسته آووکادو بدست آمده‌اند. در مراحل تولید این روغن‌ها و بعد از مرحله استخراج، فرایند خالص سازی[۲] اعمال شده‌است به نحوی که مواد ناخواسته زائد در آنها حذف شده‌اند. شکل۱، نمایی از نمونه‌های آزمایشگاهی را نشان می‌دهد.



الف ب ج

شکل۱ : نمونه‌های آزمایشگاهی شامل روغن‌های گیاهی الف) کنجد، ب) هسته آلوبالو، ج) هسته آووکادو

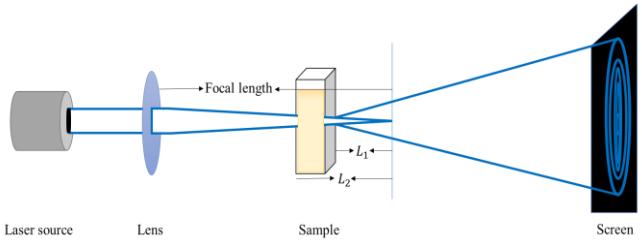
روش آزمایشگاهی

روش مدولاسیون خود فاز فضایی روشی ساده و دقیقی است که برای مطالعه رفتار اپتیک غیرخطی مواد استفاده می‌شود. شکل۲ چیدمان آزمایشگاهی این روش را نشان می‌دهد. مدولاسیون خود فاز فضایی زمانی رخ می‌دهد که پرتو گاوسی شدید نوری از یک

[۱] Cold pressing
[۲] Filtering

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

محیط با خاصیت اپتیک غیرخطی عبور کند. در نتیجه، ضریب شکست غیرخطی بر اساس گرمایی القایی و اثر اپتیکی کر تغییر می‌کند [۲].



شکل۲ : چیدمان آزمایشی تکنیک مدولاسیون خود فاز فضایی برای مطالعه پاسخ‌های اپتیک غیرخطی.

در آرایه آزمایشگاهی بکاربرده شده در این مقاله، از عدسی با نقطه کانونی ۱۰ سانتی‌متر برای تمرکز پرتو لیزر و تمرکز آن بر روی نمونه‌ها استفاده می‌شود. همچنین، سعی شده‌است که با بکارگیری چیدمان فیلتر فضایی پرتو و پس از آن بکارگیری یک روزنه در حد ممکن و تا جایی که بصورت تجربی با انتخاب مرکز پرتو، نمایه پرتو بهینه مورد استفاده قرار گیرد. پس از عبور لیزر کانونی شده توسط نمونه، الگوهای پراش شامل مجموعه‌ای از حلقه‌های متحدالمرکز بر روی پرده در فاصله‌ی بسیار دور از نمونه مشاهده می‌شوند. در این روش، طرح الگوها مشاهده شده و تعداد حلقه‌ها به شدت لیزر ورودی وابسته است. مشاهده حلقه‌های متحدالمرکز از این رویداد ناشی می‌شود که سهم غیرخطی ضریب شکست نمونه به دلیل عدم یکنواختی شدت گاوسی لیزر در سطح مقطع پرتو نوری، با اندازه شدت‌های میدان متفاوت مواجه می‌شود و در نتیجه در نواحی مختلف، جبهه موج فرودی تغییر فاز $\Delta\phi(r)$ مختلف با مقدار تعریف شده در معادله (۱) را تجربه می‌کند [۸]:

$$\Delta\phi(r)=\frac{2\pi n_0 n_2 I_0 L_{eff}}{\lambda}\exp\left(-\frac{2r^2}{\omega_0^2}\right) \qquad (۱)$$

در این رابطه، n_0 ضریب شکست خطی و n_2 ضریب شکست غیرخطی نمونه است. I_0 شدت پرتو لیزر در مرکز پروفایل گاوسی، λ طول موج پرتو لیزر و ω_0 شعاع کمر پرتو است. L_{eff} طول موثر نمونه است که در زمان برهم‌کنش با نور لیزر می‌توان با استفاده از معادله (۲) محاسبه کرد:

$$L_{eff}=z_0\arctan\left(z/z_0\right)\Big|_{L_1}^{L_2} \qquad (۲)$$

در این رابطه، z_0 طول ریلی، L_1 و L_2 فاصله بین سطوح جلو و عقب سلول و نقطه کانون لنز است. الگوهای پراش زمانی مشاهده می‌شود که اختلاف فاز بین هر دو نقطه r_1 و r_2 در جهت شعاعی پرتو گاوسی رابطه (۳) را ایجاد کند.

$$\Delta\phi(r_1)-\Delta\phi(r_2)=m\pi \qquad (۳)$$

m یک عدد صحیح است، که به ازای مقادیر زوج حلقه روشن و به ازای مقادیر فرد، حلقه‌های تاریک شکل گرفته و بر روی پرده مشاهده می‌شوند. اختلاف فاز بین مرکز پرتو گاوسی ($r_1=0$) و بی‌نهایت ($r_2=\infty$) با N تا حلقه، به صورت زیر محاسبه می‌گردد:

$$\Delta\phi(0)-\Delta\phi(\infty)=N\pi \qquad (٤)$$

از معادله (۱):

$$\Delta\phi(\infty)=0 \qquad (٥)$$

$$\Delta\phi(0)=\frac{2\pi n_0 n_2 I_0 L_{eff}}{\lambda} \qquad (٦)$$

با جایگزینی معادله (۵) و (٦) در معادله (٤)، می‌توان مقدار ضریب شکست غیرخطی مواد را محاسبه کرد:

$$n_2=\frac{\lambda}{2n_0 L_{eff}}\frac{N}{I} \qquad (۷)$$

همچنین، پذیرفتاری الکتریکی مرتبه سوم غیرخطی نمونه χ^3 را با استفاده از معادله زیر قابل محاسبه است:

$$\chi^3=\frac{c\lambda n_0}{2.4\times10^4\pi^2 L_{eff}}\frac{dN}{dI} \qquad (۸)$$

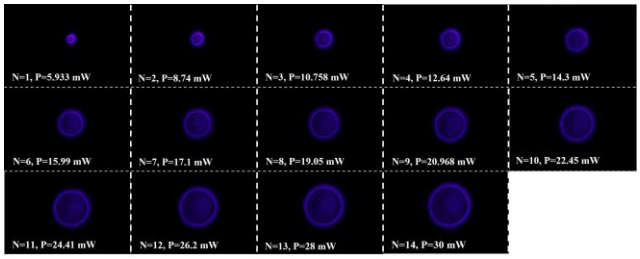
c سرعت نور و $\frac{dN}{dI}$ شیب نمودار بین شدت و تعداد حلقه‌ها است. با استفاده از مقادیر $n_0=1.47$، $L_1=10\,mm$، $L_2=20\,mm$ و شعاع پرتو در کانون $\omega_0=0.1mm$ بر اساس معادلات فوق و نمودارهای تجربی به‌دست‌آمده، ضریب شکست غیرخطی n_2 و پذیرفتاری الکتریکی غیرخطی χ^3 برای نمونه‌ها طبق جدول۱ محاسبه شده‌است.

نتایج و بحث

با افزایش شدت نور لیزر از صفر به مقادیر بیشینه ممکن، ابتدا نقطه دایره‌ای مشخص لیزر گاوسی مشاهده می‌شود با تمرکز پرتو لیزری بر نمونه و افزایش تدریجی شدت لیزر، الگوی پراش ناشی از مدولاسیون خودفاز فضایی پدیدار می‌شود. با مشاهده الگوی

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

پراش مدولاسیون خودفاز فضایی، افزایش توان منجر به افزایش تعداد و شعاع حلقه ها می‌شود، به طوری که حلقه‌های جدید از مرکز الگوی پراش شکل گرفته و اندازه آنها با افزایش تدریجی توان لیزری، افزوده می‌شود. شکل۳ الگوهای پراش نوعی مشاهده شده برای نمونه روغن آووکادو را در توان‌های مختلف لیزر نشان می‌دهد.

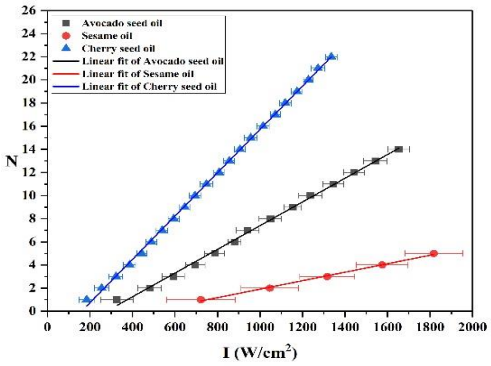


شکل۳: تغییرات الگوی حلقه پراش روغن هسته آووکادو دریافت شده توسط دوربین دیجیتالی Canon با توان نور ورودی

در شکل٤، تغییرات تعداد حلقه‌های مشاهده‌شده بر حسب تغییرات توان فرودی را نشان می‌دهد. در این شکل دیده می‌شود که حداقل توان لیزر لازم برای مشاهده تعداد مشخصی از حلقه‌ها برای هر نمونه متفاوت است. این بدان معنی است که هر از نمونه‌ها رفتار غیرخطی متفاوتی را نشان می‌دهند. همچنین دیده می‌شود که در بازه مقادیر توان‌های تابشی بکار برده شده، رابطه بین شدت لیزر و تعداد حلقه‌ها به صورت خطی تغییر می‌کند. در واقع با افزایش شیب خط برازش‌شده، خواص اپتیک غیرخطی افزایش می‌یابد. به وضوح دیده می‌شود نمونه‌هایی با رفتار غیرخطی شدیدتر، توان آستانه‌ای کمتری برای مشاهده اولین حلقه پراش را نیاز دارند. در جدول۱ مقادیر شیب خط dN/dI، ضریب شکست غیرخطی n_2، پذیرفتاری الکتریکی غیرخطی χ^3، و توان آستانه P_{th} برای هر یک از نمونه‌ها گزارش شده‌است.

جدول۱ : ضرایب غیرخطی محاسبه شده با استفاده از تکنیک SSPM

نمونه	dN/dI (cm^2/W)	n_2 (cm^2/W)	χ^3 (m^2/V^2)	P_{th} (mW)
کنجد	۰/۰۰۳۶۷	۰/۵۳ × ۱۰$^{-۶}$	۰/٤۰۳ × ۱۰$^{-۹}$	۱۳/۱۲
هسته آووکادو	۰/۰۱۰۲۵	۱/٤۷ × ۱۰$^{-۶}$	۱/۱۲ × ۱۰$^{-۹}$	۵/۹۳۳
هسته آلوبالو	۰/۰۱۸۷۲	۲/۷ × ۱۰$^{-۶}$	۲/۰۵ × ۱۰$^{-۹}$	۳/۳۵۵



شکل٤: تعداد حلقه‌ها در الگوی مدولاسیون خود فاز فضایی به عنوان تابعی از شدت فرودی لیزر برای روغن‌های هسته آووکادو، کنجد، و هسته آلوبالو.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش با استفاده از روش مدولاسیون خود فاز فضایی SSPM، رفتار اپتیک غیرخطی سه نوع از روغن‌های گیاهی کنجد، هسته آووکادو و هسته آلوبالو مورد بررسی قرار گرفت. بر اساس نتایج بدست‌آمده، روغن‌های مورد بحث رفتار اپتیک غیرخطی بسیار قابل توجهی از خود نشان می‌دهند. از این رو، مطالعه پاسخ غیرخطی روغن‌های گیاهی گوناگون با غلظت متفاوت و یا نمونه‌های ترکیبی از روغن‌های گوناگون، به عنوان شاخصی علمی و قابل اندازه‌گیری در اصالت‌سنجی روغن‌های گیاهی همانند دیگر مایعات خوراکی، پیشنهاد می‌شود.

مرجع‌ها

[۱] T.H. Maiman, Addendum 10: Reprint of TH Maiman,"Stimulated Optical Radiation in Ruby," *Nature*, **187**, 493–494 (August 6, 1960), in: *The Laser Inventor*, Springer, 2018, pp. 299-301.
[۲] R.W. Boyd, The nonlinear optical susceptibility, *Nonlinear optics* 3th edition, 1-67, (2008).
[۳] C. Li, *Nonlinear optics, Principles and Applications*, (2007).
[٤] O. Marbello O, S. Valbuena D, F. Racedo N, Optical limiting phenomenon study in oils of vegetable origin, *Journal of applied research and technology*, **18** (2020) 333-340.
[٥] F.Z. Henari, S. Cassidy, Non-linear optical properties and all optical switching of Congo red in solution, *Optik*, **123** (2012) 711-714.
[٦] M. Ribeiro, R. Turchiello, S. Gómez, Employment of laser beam self-phase modulation for detecting adulterations in light-absorbing commercial fluids, *Food Analytical Methods*, **12** (2019) 908-913.
[۷] Z. Mousavi, B. Ghafary, M.M. Ara, Fifth-and third-order nonlinear optical responses of olive oil blended with natural turmeric dye using z-scan technique, *Journal of Molecular Liquids*, **285** (2019) 444-450.
[۸] Y. Liao, C. Song, Y. Xiang, X. Dai, Recent Advances in Spatial Self-Phase Modulation with 2D Materials and its Applications, *Annalen der Physik*, **532** (2020) 2000322.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مطالعه اصول اولیه خواص مغناطیسی و فونونی Ti_nO_{2n-1}

حسینی، سید وحید[۱]؛ عباس‌نژاد، محدثه[۲]؛ محمدی‌زاده، محمدرضا[۱]

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

[۲] دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان، ایران

چکیده

در کار حاضر، خواص مغناطیسی و ارتعاشی ترکیبات Ti_nO_{2n-1} از قبیل Ti_2O_3، Ti_3O_5 و Ti_4O_7 بر اساس نظریه تابعی چگالی در دو تقریب GGA و $GGA+U$ مورد بررسی قرار گرفت. مطابق نتایج، تقریب GGA تمام این ساختارها را فلز و فرومغناطیس پیش بینی می کند که با تجربه سازگاری ندارد، زیرا این مواد نیم‌رسانا (به‌جز فاز $\gamma-Ti_3O_5$ که فلزی است) با گاف نواری حدود ۰٫۸ eV بوده و در نظم آنتی فرومغناطیس و پارامغناطیس قرار دارند. همچنین این تقریب فازهای $\alpha-Ti_3O_5$ و $\beta-Ti_3O_5$ را ناپایدار پیش بینی می کند. با انتخاب U مناسب برای این ترکیبات نه تنها گاف نواری، موقعیت نواری و نظم مغناطیسی در این مواد تصحیح شد، بلکه فازهای α و β نیز پایدار شدند. این نشان می‌دهد که برهمکنش دوقطبی-دوقطبی الکترونی در این مواد می تواند مهم باشد. نمودار انرژی آزاد بر حسب دما نشان می دهد که ساختارTi_4O_7 در دماهای بالا از سایر فازها پایدار تر خواهد بود. محاسبات ظرفیت گرمایی نیز با تجربه سازگاری مناسبی دارد.

واژه‌های کلیدی: خواص الکترونی، خواص مغناطیسی، خواص ترمودینامیکی، Ti_2O_3، Ti_3O_5، Ti_4O_7.

First-principles study of magnetic and phonon properties of Ti_nO_{2n-1}

Hosseini, S.Vahid[1]; Abbasnejad, Mohaddeseh[2], Mohammadizadeh, M.R[1]

[1] *Superconductivity Research Laboratory (SLR), Department of Physics, University of Tehran, North Kargar Av., P.O. Box 14395-547, Tehran, Iran*

[2] *Faculty of Physics, Shahid Bahonar University of Kerman, Kerman, Iran*

Abstract

In the present work, the magnetic, and vibrational properties of Ti_nO_{2n-1} compounds such as Ti_2O_3, Ti_3O_5 and Ti_4O_7 based on the density functional theory in GGA and GGA+U were investigated. According to the results, GGA predicts all of these structures metallic and ferromagnetic, which is inconsistent with the experiment. Since these structures are semiconductor (except γ-Ti_3O_5 which is metallic) haveing a narrow bandgap by order of 0.1 eV and antiferromagnetic and paramagnetic ordering. This approximation also predicts α-Ti_3O_5 and β-Ti_3O_5 phases to be unstable. By selecting the appropriate U for these compounds, not only the band gap, band position and magnetic ordering were corrected, but also α and β phases were stabilized. This also suggests that electronic dipole-dipole interactions can be important in these materials. The free energy diagram in terms of temperature shows that Ti_4O_7 would be more stable at high temperatures than other phases. Heat capacity calculations are also compatible with the experiment.

***Keywords**: Electronic properties, Magnetic properties, Thermodynamic properties, Ti_2O_3, Ti_3O_5, Ti_4O_7.*

PACS No. 70

مقدمه

اخیراً، ترکیبات بر پایه تیتانیوم اکسیدی با فرمول Ti_nO_{2n-1} (n می تواند از ۱ تا ۱۰۰ وجود داشته باشد) مورد توجه محققان قرار گرفته‌اند. این موارد دارای گاف نواری باریکی در مرتبه ۰٫۱ eV هستند [۱]. به تازگی در این مواد ابررسانایی دیده شده است و از این مواد در کاربردهای الکتریکی همچون مقاومت‌های حافظه‌دار نیز استفاده می‌شود. دمای گذار ابررسانایی این ساختارها از ۱K تا ۸ K گزارش شده است که به نظر می رسد سازوکار ابررسانایی می تواند ناشی از برهمکنش فونون های شبکه با الکترون ها باشد [۲]. اولین فاز این ترکیبات ساختار Ti_2O_3 دارای تقارن راست گوشه (Orthorhombic) و گاف نواری حدود ۰٫۲ eV است [۳]. این ترکیب در دمای ۴۰۰-۵۰۰ K دچار تغییر ساختار الکترونی می‌شود. ماده Ti_3O_5 شامل سه فاز α، β و γ است که فاز اول در تقارن راست گوشه، و فاز دوم و سوم در تقارن تک میلی (Monoclinic) قرار دارند [۱]. مطابق نتایج تجربی فاز β نیم‌رسانا با گاف نواری ۰٫۱ eV است در حالی‌که فاز γ خاصیت فلزی از خود نشان می دهد [۴]. اطلاعاتی در مورد خواص الکترونی فاز α وجود ندارد اما پیش بینی می‌شود که این فاز نیز نیم‌رسانا باشد. فازهای نام برده در حالت آنتی فرومغناطیس قرار دارند در حالی‌که ساختار γ-Ti_3O_5 دارای نظم پارامغناطیس است. فاز Ti_4O_7، دارای تقارن سه میلی (Triclinic)، اولین ترکیب خانواده مگنولی (Magnéli) است که

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

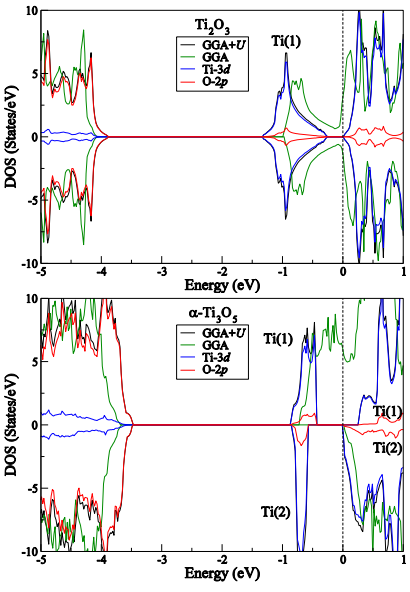
زیر دمای K ۱۴۰ نیم‌رسانا با گاف نواری eV ۰/۶ است. در دمای بین K ۱۵۰-۱۴۰ در فاز دمای میانی است که هنوز نیم‌رسانا است و در دمای بالاتر از K ۱۵۰ به فاز فلزی می‌رود [۵]. تحقیق حاضر سعی در بررسی خواص فیزیکی این ترکیبات در حالت نیم‌رسانا دارد. نتایج محاسبات می‌تواند راهی را برای مطالعات این مواد در زمینه اپتوالکتریک، پیزوالکتریک، و اسپینترونیک باز نماید.

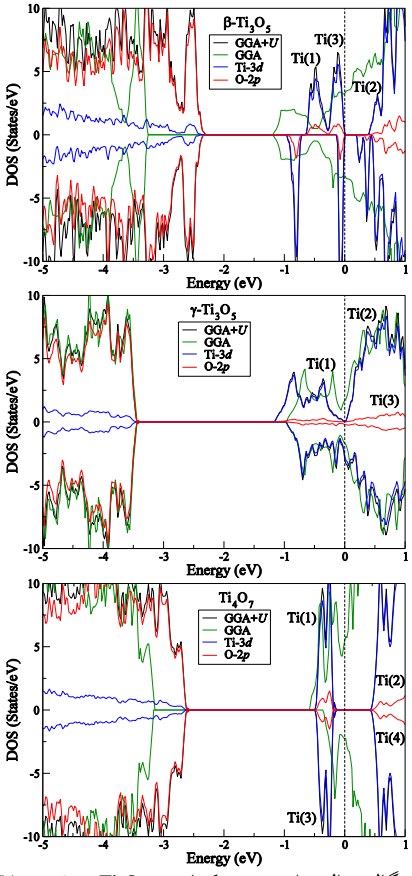
روش محاسباتی

محاسبات ابتدا به ساکن بر اساس نظریه تابعی چگالی و با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو (Quantum ESPRESSO) [۶] 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. به منظور تصحیحات برهمکنش کولنی الکترون-الکترون از مدل هابارد (GGA+U) استفاده شده است. محاسبات فونونی با بسته محاسباتی Phonopy [۷] انجام شده است.

نتایج

شکل ۱ چگالی حالت های الکترونی مواد Ti_nO_{2n-1} را در دو تقریب GGA و GGA+U نشان می‌دهد. همان طور که مشاهده می‌شود، تقریب GGA این ترکیبات را فلز پیش بینی می‌کند که با تجربه مطابقت ندارد.





شکل۱ : نمودار چگالی حالت‌های جزئی ترکیبات Ti_nO_{2n-1} در تقریب GGA و GGA+U. انرژی فرمی بر روی نقطه صفر تنظیم شده است.

برای تصحیح این وضعیت از تقریب GGA+U استفاده شد. پارامتر هابارد (U) را به صورت تجربی برگزیدیم. به این معنی که این پارامتر را به گونه ای انتخاب کردیم که اندازه گاف نواری و همچنین موقعیت نوارها نسبت به داده‌های فوتوگسیل الکترونی موجود تطابق داشته باشند. نتایج محاسبات GGA+U در جدول ۱ آورده شده است.

جدول ۱: پارامتر هابارد برای اربیتال d اتم تیتانیوم (U_{Ti})، گاف نواری محاسبه شده و تجربی [۱] برای ترکیبات Ti_nO_{2n-1}.

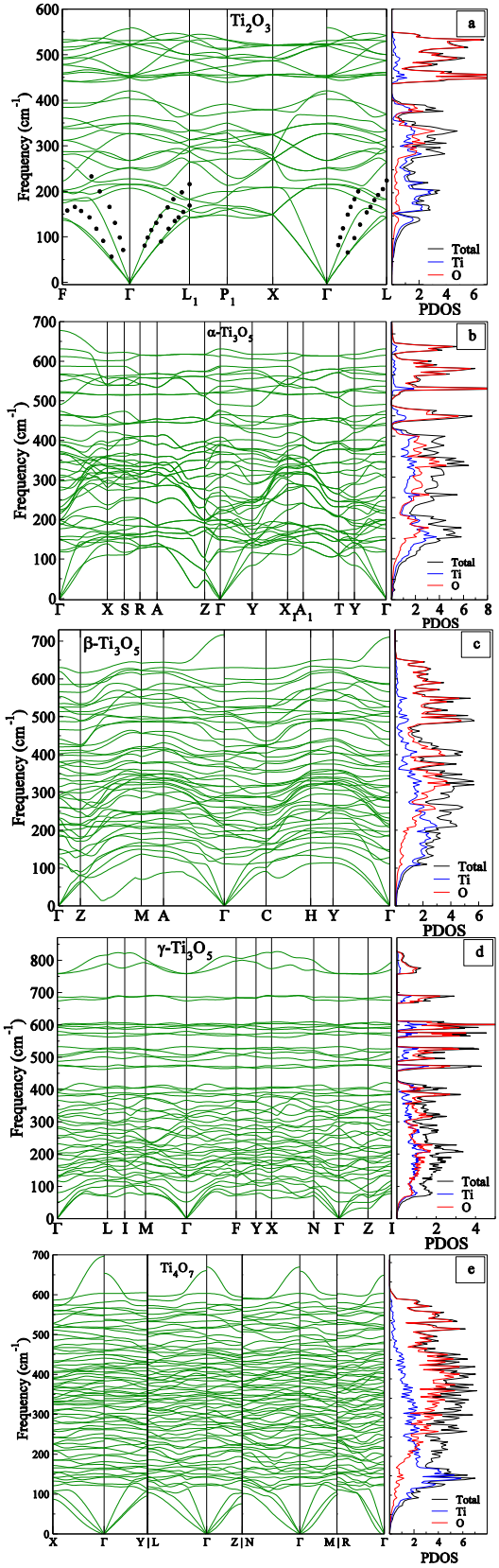
ساختار	U_{Ti} (eV)	کار حاضر (eV)	گاف تجربی (eV)
Ti_2O_3	۱/۶۰	۰/۳	۰/۲
α-Ti_3O_5	۲/۲۰	۰/۴	-
β-Ti_3O_5	۲/۲۰	۰/۱	۰/۱
γ-Ti_3O_5	۱/۰۰	۰	۰
Ti_4O_7	۲/۲۰	۰/۷	۰/۶

منحنی چگالی حالت‌های الکترونی نشان می‌دهد اکثر حالت‌های ظرفیت در انرژی‌های پایین از ترازهای اکسیژن تشکیل شده است در حالی‌که ترازهای تیتانیوم در اطراف انرژی فرمی نقش مهمی را ایفا می‌کنند. در مورد

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

ساختار β-Ti_3O_5 دو قله قبل از تراز فرمی مشاهده می‌شود. در این ساختار سه اتم تیتانیوم (Ti1, Ti2, Ti3) و پنج اتم اکسیژن غیرمعادل وجود دارد. قله اول مربوط به پیوندهای Ti3-Ti3 است که پیوندهای بایپلارونی (Biplarons) هستند که از ترکیب اسپین بالا و پایین در حالت یکتایی به وجود می‌آیند و قله دوم مربوط به پیوندهای Ti1-Ti1 است که از اوربیتال-های صفحه‌ای d تشکیل شده‌اند. باید خاطر نشان کرد که این قله‌ها که در داده‌های تجربی دیده می‌شوند در تقریب GGA بازتولید نمی شوند. علاوه بر این، تصحیح هابارد در ساختار γ-Ti_3O_5 منجر به گاف نواری صفر در حالت اسپین بالا می‌شود در حالی‌که نوارهای الکترونی اسپین پایین تراز فرمی را قطع می‌کنند. نتایج محاسبات با مرجع [۸] مطابقت دارد. به‌طور مشابه، قله جایگزیده‌ای که در ساختار Ti_4O_7 مشاهده می‌شود مربوط به وجود پیوندهای بایپلارونی در این ساختار است. محاسبات مغناطیسی GGA+U نشان داد که مغناطیس کل ساختارهای Ti_2O_3، Ti_3O_5 در فاز α و β و Ti_4O_7 صفر شده است. در ساختار Ti_2O_3 و Ti_4O_7 منحنی اسپین بالا دقیقاً منطبق بر اسپین پایین است که نشان می دهد این ماده دارای نظم آنتی فرومغناطیس است. فازهای Ti_3O_5 همگی دارای فازهای پارامغناطیس هستند. به‌علاوه، در ساختار Ti_4O_7 نظم اوربیتالی نیز دیده می‌شود که در ادامه بحث می‌شود. با توجه به ممان مغناطیسی اتم‌های تیتانیوم Ti_4O_7 (چهار اتم غیرمعادل)، کاتیون‌های تیتانیوم به دو زیرگروه تقسیم می‌شوند. نسبت ممان مغناطیسی Ti(1) به Ti(3) برابر ۰٫۵۹ μ_B /-۰٫۶۰ و همچنین نسبت ممان مغناطیسی Ti(2) به Ti(4) برابر ۰٫۰۱ μ_B-۰٫۰۰ است.

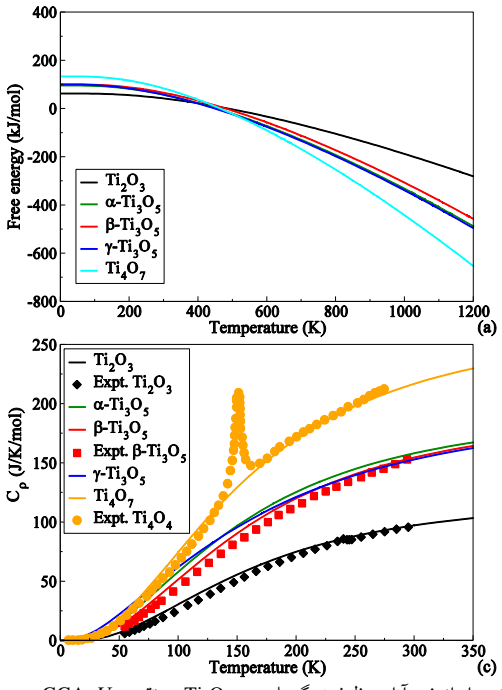
بنابراین، یکی از اوربیتال‌های t_{2g} با حالت های اسپین بالا و پایین متناظر با Ti(3) و Ti(1) دارای اشغال d^1 است که قویاً جایگزیده است، در حالی‌که دیگر اوربیتال‌های t_{2g} با حالت‌های متناظر با Ti(2) و Ti(4) دارای اشغال d^0 هستند و در بالای تراز انرژی فرمی قرار می‌گیرند. درنتیجه، می‌توان استدلال کرد که در این ساختار نظم اوربیتالی وجود دارد. همچنین محاسبات GGA+U فونونی نشان می دهد که این ساختارها پایدار هستند (با ایجاد حالت نیمرسانا و شامل نمودن برهمکنش دوقطبی-دوقطبی الکترونی، ثابت‌های نیرو تصحیح می‌شوند) در حالی که محاسبات GGA ساختارهای α و β را ناپایدار پیش بینی می‌کرد. مقایسه بسامدهای فونونی در تقریب GGA نسبت به GGA+U نشان می دهد که در تقریب GGA+U بسامدهای آکوستیکی نسبت به GGA تقریباً بدون تغییر می‌مانند، در حالی که مدهای نوری در بسامدهای بالاتر افزایش می یابند.



شکل۲ : نمودار پاشندگی فونونی ترکیبات Ti_nO_{2n-1} در تقریب GGA+U.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

داده‌های تجربی فونونی Ti_2O_3 با دایره های سیاه در شکل ۲ نشان داده شده است [۹]. با مقایسه با تجربه، شاخه های صوتی محاسبه شده پایین تر محاسبه شده است. علت این اختلاف می تواند در این باشد که نمونه تجربی بس بلوری (Ploycrystalline) است در حالی‌که محاسبات حاضر برای تک بلور انجام شده است. با توجه به شکل ۲ بسامدهای پایین و بالا به ترتیب بیشتر به نوسان های اتم Ti و O بر می گردد که به دلیل اختلاف جرم Ti نسبت به O است. همچنین علت ناپیوستگی در فرکانس مرکز ناحیه در این ساختارها وجود برهمکنش دوقطبی-دوقطبی الکترونی در این ترکیبات است که خاصیت یونی دارند. اما در ساختار Ti_2O_3 علاوه بر برهمکنش دوقطبی-دوقطبی الکترونی علت دیگر ناپیوستگی فونونی در راستاهای L-Γ و X-Γ به نظم مغناطیسی نیز بر می گردد که در راستای اولی اتم ها دارای نظم فرومغناطیسی هستند، در حالیکه در راستای دومی نظم آنتی فرومفناطیس تشکیل می دهند. در شکل ۴ منحنی انرژی آزاد و ظرفیت گرمایی ویژه بر حسب دما را نشان می دهد که پیداست داده های تجربی [۱۰و۱۱] مطابقت خوبی با محاسبات حاظر دارند. ساختار Ti_4O_7 در دماهای بالا نسبت به سایرین پایدارتر خواهد بود. قله مشاهده شده در منحنی ظرفیت گرمایی Ti_4O_7 به خاطر گذار فاز ساختاری این ترکیب است که در تقریب هارمونیک بازتولید نمی شود.



شکل۳ : نمودار انرژی آزاد و ظرفیت گرمایی Ti_nO_{2n-1} در تقریب GGA+U

همچنین مشاهده می شود که Ti_2O_3 و Ti_4O_7 دارای کمترین و بیشترین ظرفیت گرمایی هستند که این به خاطر تعداد اتم‌های غیرمعادل کمتر Ti_2O_3 نسبت به Ti_4O_7 است.

نتیجه‌گیری

محاسبات اصول اولیه خواص الکترونی، مغناطیسی و فونونی ساختارهای Ti_2O_3، Ti_3O_5 و Ti_4O_7 در چارچوب نظریه تابعی چگالی مورد بررسی قرار گرفت. تقریب GGA خواص الکترونی این مواد علی‌رغم این‌که نیم‌رسانا هستند (به‌جز γ-Ti_3O_5)، فلزی پیش‌بینی می‌کند. محاسبات GGA+U گاف نواری و موقعیت نوارها را برای این ساختارها بهبود می‌بخشد. همچنین محاسبات GGA+U حالت مغناطیسی مواد Ti_2O_3 و Ti_4O_7 که در فاز آنتی فرومغناطیس به خوبی بازتولید می نماید. همچنین محاسبات نشان می دهند که در ساختار Ti_4O_7 نظم اوربیتالی وجود دارد. محاسبات GGA+U همه ساختارها را پایدار در حالی که GGA ساختارهای α و β را ناپایدار پیش بینی می‌کند. محاسبات ترمودینامیکی نشان می‌دهد که Ti_4O_7 در دماهای بالا از بقیه ساختارها پایدارتر خواهد بود.

سپاسگزاری

از حمایت مالی معاونت پژوهشی دانشگاه تهران تشکر می‌کنیم .

منابع

[۱]. Xu. B et al., RSC advances, **6**, 79706-79722 (2016).
[۱]. Hosseini, S. V et al., Physical Review B, **104** (22), 224101 (2021).
[۲]. Uchida. M et al., *Physical review letters*, ***101***, 066406 (2008).
[۳]. K. Kobayashi et al., Phys. Rev. B **95**, 085133 (2017).
[۴]. M. Abbate et al., Phys. Rev. B **51**, 10150 (1995).
[۵]. Giannozzi, et al, *Journal of Physics*: *Condensed Matter*. **21**, 395502 (2009).
[۶]. A. Togo and I. Tanaka, *Scripta Materialia*, **108**, 1-5 (2015).
[۷]. Liu, R et al., *Computational materials science*, ***81***, 158-162 (2014).
[۸]. Yethiraj, M et al., AIP Conference Proceedings, American Institute of Physics: 343-345 (1982).
[۹]. Chai, G. et al., *Journal of Alloys and Compounds*, ***621***, 404-410 (2015).
[۱۰]. Hasegawa, G et al., *Chemistry of Materials*, ***25***, 3504-3512 (2013).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی اثر برهم‌کنش الکترون-ناخالصی بر پلاسمون‌های ساختار دوبعدی دی‌سولفید مولیبدن

حسینی یمین، سید محمد؛ وظیفه‌شناس، ترانه

دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید بهشتی (ره)، ۱۹۸۳۹۶۹۴۱۱، تهران

چکیده

در این مقاله، به مطالعه‌ی برهم‌کنش الکترون-ناخالصی در تک‌لایه‌ی دی‌سولفید مولیبدن می‌پردازیم . برای این منظور، از تابع دی‌الکتریک دینامیکی در تقریب مرمین-لیندهارد استفاده می‌کنیم. با استفاده از این مدل طیف پلاسمونی و تابع اتلاف انرژیِ الکترون را محاسبه کرده و با نتایجی که قبلا از مدل لیندهارد بدست آمده‌اند مقایسه می‌کنیم. نتایج محاسبات عددی ما که در دمای صفر انجام شده است، نشان می‌دهند که گنجاندن اثر برخورد الکترون-ناخالصی از طریق یک زمان واهلش در چارچوب تقریب مرمین-لیندهارد موجب می‌گردد تا مدهای برانگیختگی پلاسمونی به سمت مقادیر بزرگتر انرژی جابجا شوند.

واژه های کلیدی: *دی‌سولفید مولیبدن، تقریب فاز تصادفی، تابع قطبش، تابع دی‌الکتریک دینامیکی، برهم‌کنش الکترون-الکترون، برهم‌کنش الکترون-ناخالصی، مدل لیندهارد، مدل مرمین-لیندهارد، پلاسمون*

The effect of electron-impurity interaction on plasmons of a two-dimensional structure of molybdenum disulfide

Hosseini Yamin, Seyed Mohammad; Vazifehshenas, Taraneh

Department of Physics, Shahid Beheshti University, 1983969411, Tehran, Iran

Abstract

In this paper, we investigate the electron-impurity interaction in a molybdenum disulfide monolayer. For this purpose, we use the dynamical dielectric function within the Mermin-Lindhard approximation. Using this model, we calculate the plasmonic dispersion and electron energy loss function and compare the results with those obtained from Lindhard model. Our numerical calculations which carried out at zero temprature indicate that including the electron-impurity collision through a relaxation time in the framework of the Mermin-Lindhard approach shifts the plasmon excitation modes to higher energies.

Keywords *Molybdenum disulfide, Random phase approximation, Polarization function, Electron-electron interaction, Electron-impurity interaction, Lindhard model, Mermin-Lindhard model, Plasmon*

PACS No. 73

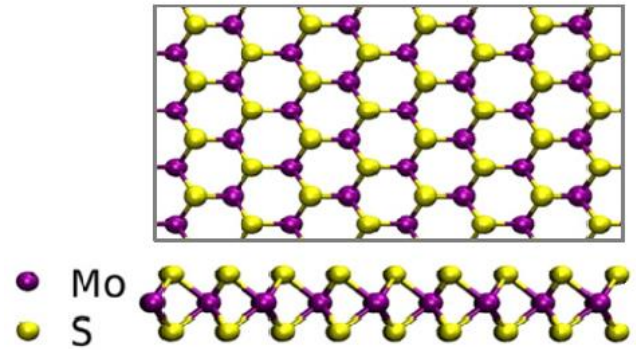
مقدمه

گرافن، به عنوان اولین ماده‌ی دوبعدی کشف شده، نظرات بسیاری از فیزیکدانان حوزه‌ی ماده چگال را به دلیل دارا بودن خواص الکترونی استثنائی به خود جلب نمود. اما نقاط ضعفی نیز داشت که مهم‌ترین آن‌ها نداشتن گاف انرژی و همچنین کوچک بودن برهم‌کنش اسپین-مدار اتم‌های کربن بود. بدین ترتیب جست‌وجو برای مواد دوبعدی دیگر آغاز گردید. یکی از این مواد که توجه زیادی را معطوف خود کرد، دی‌سولفید مولیبدن تک‌لایه است. این نیم‌رسانا دارای گاف مستقیم بزرگی است که مقدار آن برابر با 1.9eV می‌باشد. همچنین برخلاف گرافن، برهم‌کنش اسپین-مدار به دلیل اوربیتال‌های d اتم‌های مولیبدن مقداری قابل توجه، برابر با 80meV می‌باشد[1]. این ویژگی‌ها، تک‌لایه دی‌سولفید مولیبدن را انتخاب مناسبی برای نسل آتی سوئیچرها[1] (مانند ترانزیستورها) معرفی می‌کند[2]. ترانزیستورهای اثر میدانی[2] که در درون آن‌ها تراشه‌ای از نیم‌رسانای دی‌سولفید مولیبدن استفاده شده است دارای نسبت بالای جریان روشن-خاموش هستند[3]. ساختار دی‌سولفید مولیبدن[3] یک ساختار شش‌گوشه‌ی بدون مرکز است که در آن سه صفحه‌ی موازی با یکدیگر از اتم‌های گوگرد و مولیبدن قرار گرفته‌اند. در شکل (۱) ساختار این ماده نشان داده شده است. در ناحیه اول بریلوئن شبکه‌ی وارون تک‌لایه دی‌سولفید مولیبدن، دو نقطه‌ی متفاوت، K و K'، وجود دارد که با نمایه $(\tau = \pm 1)$ مشخص می‌شوند. برهم‌کنش اسپین-

[1] Switchers
[2] Field effect transistor
[3] Molybdenum disulfide

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مدار باعث شکافت اسپینی در نوار ظرفیت می‌شود. البته این شکافت در دو دره K و K' به دلیل تقارن وارونگی زمانی معکوس یکدیگر هستند[4]. در بررسی برهم‌کنش الکترون-ناخالصی در تک‌لایه دی‌سولفید مولیبدن به مطالعه‌ی طیف پلاسمون در حضور ناخالصی در این ماده می‌پردازیم. پلاسمون‌ها، نوعی برانگیختگی جمعی هستند که به دلیل بلندبرد بودن برهم‌کنش کولنی پدیدار می‌شوند. برای محاسبه‌ی طیف پلاسمون در این حالت از مدل مرمین-لیندهارد[4] استفاده می‌کنیم. مدل مرمین-لیندهارد، با اعمال یک اصلاح از مدل لیندهارد به دست می‌آید[5]. طیف پلاسمون در حالت عدم وجود ناخالصی با استفاده از مدل لیندهارد[5] قبلا محاسبه شده است[1]. در بخش نتایج به مقایسه نتایج بدست آمده از این دو مدل خواهیم پرداخت.



شکل ۱. ساختار بلوری تک لایه دی‌سولفید مولیبدن از بالا و پهلو. اتم‌های مولیبدن در صفحه‌ی میانی و اتم‌های گوگرد در دو صفحه بالایی و پایینی قرار دارند.

هامیلتونی موثر

رستمی، کارمونیوس و همکارانشان[2,4] یک هامیلتونی موثر دو نواره ارائه دادند که تک‌لایه‌ی دی‌سولفید مولیبدن را در اطراف نقاط K و K' توصیف می‌کند($\hbar = 1$):

$$H^{\tau s} = \frac{\Delta}{2}\sigma_z + s\tau\lambda\frac{1-\sigma_z}{2} + t_0 a_0 \mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\sigma}_\tau + \frac{k^2}{4m_0}(\alpha + \beta\sigma_z) + t_1 a_0{}^2 \mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\sigma}_\tau{}^* \sigma_x \mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\sigma}_\tau{}^* \qquad (۱)$$

در معادله بالا Δ=1.9eV، گاف انرژی و λ=80meV برهم‌کنش اسپین-مدار ذاتی است و a_0 = 1.843 Å ثابت شبکه دی‌سولفید مولیبدن است. t_0=1.68eV و t_1=0.1eV به ترتیب دامنه‌ی پرش[6] و دامنه‌ی پرش موثر پیچش مثلثی[7] است. α= 0.43 و β=2.21 است. $\sigma_{x,y,z}$ ماتریس‌های پائولی و $\boldsymbol{\sigma}_\tau = (\tau\sigma_x, \sigma_y)$ بردار ماتریس‌های پائولی است که بر درجه آزادی شبه اسپین[8] عمل می‌کند. نوارهای انرژی هامیلتونی بالا به صورت زیر است:

$$E^{\tau s} = \frac{\alpha}{4m_0}k^2 + \frac{s\tau\lambda}{2} \pm \{(a_0{}^4 t_1{}^2 + \frac{\beta^2}{16m_0{}^2})k^4 + (\frac{\Delta - s\tau\lambda}{2})^2 + k^2[a_0{}^2 t_0{}^2 + \frac{\beta(\Delta - s\tau\lambda)}{4m_0}] + 2\tau t_0 t_1 a_0{}^3 k^3 \cos(3\phi_k)\}^{\frac{1}{2}} \qquad (۲)$$

در رابطه بالا ϕ_k زاویه بردار $\mathbf{k}$ با محور k_xاست. معادله(۲) ناهمسانگردی انرژی و همچنین شکافت اسپینی نوارهای انرژی را نشان می‌دهد.

برای بررسی طیف پلاسمونی ابتدا باید تابع دی‌الکتریک را محاسبه نمود.

$$\varepsilon(\mathbf{q},\omega) = 1 - V(q)\chi_0(\mathbf{q},\omega) \qquad (۳)$$

در این مدل از تقریب فاز تصادفی یا RPA استفاده شده است[8]. در این تقریب اثر برهم‌کنش بلندبرد الکترون-الکترون در محاسبه‌ی تابع دی‌الکتریک در نظر گرفته شده است. در معادله‌ی (۳) $V(q)$ پتانسیل برهم‌کنشی کولنی و $\chi_0(\mathbf{q},\omega)$ تابع قطبش غیربرهمکنشی در فضای فوریه هستند. برای گنجاندن اثر برهم‌کنش الکترون-ناخالصی علاوه بر تقریب RPA از تقریب زمان واهلش نیز استفاده خواهیم نمود.

برانگیختگی‌های جمعی بار

در حالتی که دو شرط ذکر شده در رابطه زیر برقرار باشد، سیستم نوسانات منظم چگالی بار یا همان پلاسمون‌ها را از خود نشان می‌دهد:

$$Re\{\varepsilon(\mathbf{q},\omega)\} = 0 \qquad Im\{-\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{q},\omega)}\} \to \pm\infty \qquad (٤)$$

رابطه (٤) بیانگر این است که یک پلاسمون ریشه تابع دی‌الکتریک

[4] Mermin-Lindhard Model
[5] Lindhard model
[6] Hopping amplitude
[6] Effective hopping trigonal warping
[8] Psudospin degree of freedom

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

است و این ریشه باید به تشدید در تابع اتلاف انرژی الکترون[9] نیز منجر شود. این تابع به صورت زیر محاسبه می‌گردد:

$$Im\{-\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{q},\omega)}\}=\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1^{\,2}+\varepsilon_2^{\,2}} \qquad (۵)$$

که در آن ϵ_1 و ϵ_2 به ترتیب قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک دینامیکی هستند. تشدید در تابع اتلاف انرژی الکترون به معنای این است که الکترون‌های سریع تابیده شده از منبع خارجی که با ماده برخورد می‌کنند، انرژی خود را به صورت ایجاد یک یا چند پلاسمون از دست می‌دهند. در بخش‌هایی از فضای (q–ω) که قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک غیرصفر است، برانگیختگی‌های پلاسمونی پایدار نبوده و این پلاسمون‌ها به جفت ذره–حفره واپاشی می‌کنند. ازین رو به این نواحی پیوستار ذره–حفره[10] گفته می‌شود. این ناحیه خود از دو بخش که یک بخش ناشی از گذارهای بین‌نواری و بخش دیگر ناشی از گذارهای درون‌نواری است تشکیل می‌شود. در تک‌لایه دی‌سولفید مولیبدن به دلیل مقدار بزرگ گاف انرژی، گذارهای بین‌نواری به انرژی زیادی نیاز دارند و طیف پلاسمون در ناحیه درون‌نواری پیوستار ذره–حفره میرا شده و به جفت ذره–حفره واپاشی می‌کند.

توابع پاسخ لیندهارد و مرمین–لیندهارد

تابع قطبش غیربرهم‌کنشی χ_0 که در تابع دی‌الکتریک(معادله (۳)) معرفی شد، به تابع پاسخ چگالی–چگالی لیندهارد معروف است. به کمک این تابع می‌توان، طیف پلاسمونی را، زمانی که در سیستم ناخالصی وجود ندارد، محاسبه نمود. معادله‌ی این تابع به صورت زیر است:

$$\chi_0(\mathbf{q},\omega)=\sum_{s,\tau,\sigma,\sigma'}\int\frac{d^2k}{(2\pi)^2}\left|\left\langle\chi_\sigma^{\tau s}(\mathbf{k})\middle|\chi_{\sigma'}^{\tau s}(\mathbf{k+q})\right\rangle\right|^2 \times\frac{f[E_\sigma^{\tau s}(\mathbf{k})]-f[E_{\sigma'}^{\tau s}(\mathbf{k+q})]}{\omega-E_{\sigma'}^{\tau s}(\mathbf{k+q})+E_\sigma^{\tau s}(\mathbf{k})+i0} \qquad (۶)$$

که در آن $E_\sigma^{s\tau}$ و $\chi_\sigma^{s\tau}$ به ترتیب ویژه‌مقادیر و ویژه‌حالت‌های هامیلتونی تک‌لایه دی‌سولفید مولیبدن هستند. برای در نظر گرفتن اثر ناخالصی در طیف پلاسمون تک‌لایه دی‌سولفید مولیبدن از مدل مرمین–لیندهارد برای تابع پاسخ چگالی–چگالی استفاده می‌کنیم.

این مدل برای حفظ چگالی موضعی الکترون از تقریب زمان واهلش استفاده می‌کند. تابع قطبش در این مدل به صورت زیر است[9]:

$$\Pi^0(\mathbf{q},\omega)=\frac{(\omega+\mathrm{i}\tau^{-1})\chi_0(\mathbf{q},\omega+\mathrm{i}\tau^{-1})}{\omega+\mathrm{i}\tau^{-1}\dfrac{\chi_0(\mathbf{q},\omega+\mathrm{i}\tau^{-1})}{\chi_0(\mathbf{q},0)}} \qquad (۷)$$

و تابع دی‌الکتریک در این تقریب به شکل زیر خواهد بود:

$$\varepsilon(\mathbf{q},\omega)=1-V(q)\Pi^0(\mathbf{q},\omega) \qquad (۸)$$

τ در رابطه (۷) زمان واهلش است. $\hbar\tau^{-1}$ مقدار انرژیِ انتقالی بین الکترون فرودی و پلاسمون‌ها را تصحیح می‌کند. در رابطه‌ی (۷)، $\chi_0(\mathbf{q},0)$ تابع قطبش استاتیک لیندهارد است. با استفاده از معادله‌ی (۸) می‌توان تابع قطبش استاتیک در حضور ناخالصی را محاسبه کرد.

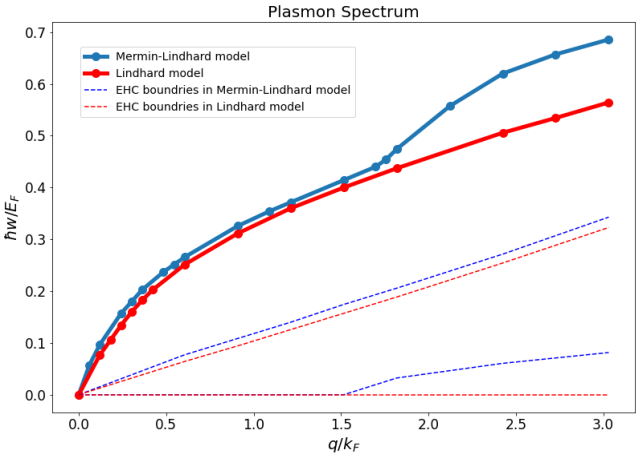
در ادامه به ارائه و تفسیر نتایج بدست آمده از محاسبات عددی برای طیف پلاسمون‌ها و تابع اتلاف انرژی الکترون در دو مدل مرمین–لیندهارد و لیندهارد می‌پردازیم.

نتایج

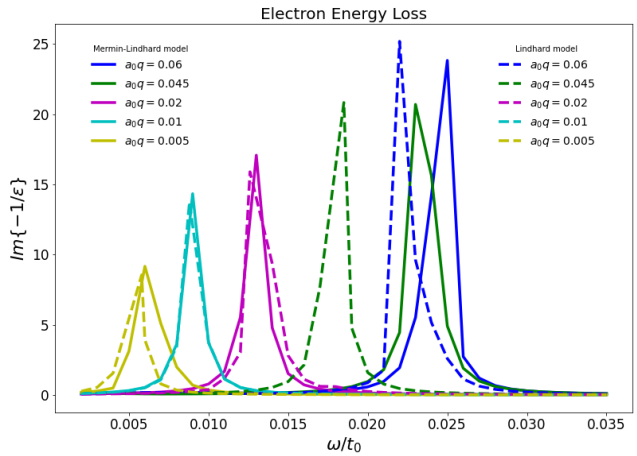
چگالی حامل‌های بار در نظر گرفته شده در نمونه‌ی بررسی شده در این مقاله برابر با $n = 10^{12}cm^{-2}$ است. همچنین تمامی محاسبات عددی، در دمای صفر(T=0) انجام شده است. در تمامی نتایج نشان داده شده، زاویه بردار موج ثابت است. با جاروب کردن صفحه (q–ω) ریشه‌های تابع دی‌الکتریک را بدست آورده و به کمک تابع اتلاف انرژی الکترون، قطب‌های پلاسمونی را در حضور ناخالصی محاسبه کرده که در شکل (۲) قابل مشاهده است. طبق شکل (۲)، هنگامی که اثر ناخالصی را در محاسبات در نظر می‌گیریم، طیف پلاسمون‌های بدست آمده از مدل لیندهارد و مرمین–لیندهارد در مقادیر بزرگ بردار موج از یکدیگر فاصله می‌گیرند. این فاصله به ازای مقادیر بزرگتر بردار موج و انرژی، بیشتر نیز خواهد شد. در تفسیر این نتیجه باید توجه داشت که در حالت حضور ناخالصی در سیستم، الکترون‌ها رابطه‌ی فازی‌ای که در حالت عدم وجود ناخالصی با یکدیگر دارند را از دست داده و دیگر همبسته نخواهند بود و وجود یک برانگیختگی دسته‌جمعی در انرژی‌هایی که پیش از این در صورت عدم حضور ناخالصی در

[9] Electron energy loss function
[10] Electron-hole continuum (EHC)

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل ۲. طیف پلاسمون تک‌لایه‌ی دی‌سولفید مولیبدن در دمای صفر، برای $\tau^{-1} = 0.001\, E_F$. نمودار قرمز رنگ مربوط به پلاسمون‌های بدست آمده از مدل لیندهارد است. نمودار آبی رنگ پلاسمون‌های بدست آمده از مدل مرمین–لیندهارد است. خطچین‌های آبی و قرمز نیز به ترتیب مرزهای ناحیه EHC را نشان می‌دهند.



شکل ۳. تابع اتلاف انرژی الکترون برای چند تکانه‌ی ثابت. قله‌ها در این شکل تشدید در تابع اتلاف انرژی الکترون را نشان می‌دهند. خطوط پر میزان اتلاف محاسبه شده بر اساس تابع دی‌الکتریک در مدل مرمین–لیندهارد است و خط چین‌ها تابع اتلاف محاسبه شده در مدل لیندهارد را نشان می‌دهند.

دسترس بودند، ممکن نیست. به بیان دیگر، در حالتی که برهم‌کنش الکترون–ناخالصی وجود دارد، امکان همبستگی آن‌ها در انرژی‌های بزرگتری فراهم می‌شود. به این دلیل در مقادیر بزرگتر بردار موج طیف پلاسمون در مدل مرمین–لیندهارد از طیف پلاسمون در مدل لیندهارد فاصله می‌گیرد. تمامی نقاطی که در شکل (۲) قابل مشاهده هستند، پلاسمون‌های پایدار تک‌لایه دی‌سولفید مولیبدن می‌باشند و برای تعدادی از این پلاسمون‌ها تابع اتلاف انرژی الکترون در شکل (۳) نشان داده شده است. در حالی که بخش حقیقی تابع قطبش دینامیکی تعیین کننده مکان شاخه‌ی پلاسمونی در فضای(q–ω) است، قسمت موهومی تابع قطبش دینامیکی، نقش مهمی در تعیین پاشندگی پلاسمونی ایفا می‌کند. ناحیه‌ای که در آن تابع قطبش دینامیکی در فضا (q–ω) غیرصفر است (پیوستار ذره–حفره)، ناحیه‌ای است که پلاسمون‌ها در آن میرا می‌شوند.

نتیجه‌گیری

برای بررسی برهم‌کنش الکترون–ناخالصی در تک‌لایه دی‌سولفید مولیبدن، از تابع قطبش مدل مرمین–لیندهارد استفاده نموده و تابع اتلاف انرژی الکترون و طیف پلاسمون الکترونی را محاسبه کردیم. همچنین، به علت میرایی پلاسمون‌ها در ناحیه‌ی برانگیختگی ذره–حفره که ناشی از گذارهای درون نواری است، اشاره نمودیم و به این دلیل در نمودار طیف پلاسمون‌ها، تنها بخش درون‌نواری پیوستار ذره–حفره رسم شده است. با مقایسه‌ی طیف پلاسمون‌ها در دو مدل لیندهارد و مرمین–لیندهارد مشاهده کردیم که به ازای بردار موج‌های بزرگ طیف پلاسمون در حضور ناخالصی از طیف پلاسمون در غیاب ناخالصی فاصله می‌گیرد. دلیل این پدیده را ناشی از برهم‌خوردن رابطه‌ی فازی الکترون‌ها در حضور ناخالصی تفسیر نمودیم و وجود پلاسمون پایدار را منوط به دسترسی الکترون‌ها به انرژی‌های بزرگتری نسبت به طیف پلاسمون در غیاب ناخالصی دانستیم.

مرجع‌ها

[1] A. Scholz, T. Stauber, and J. Schliemann Phys. Rev. B, **88**, 035135 (2013).
[2] H. Rostami, A. G. Moghaddam, and R. Asgari Phys. Rev. B, **88**, 085440 (2013).
[3] Z. M. Wang. *MoS2: Materials, Physics, and Devices* (Springer International Publishing, 2013).
[4] A. Kormányos, V. Zólyomi, N. D. Drummond, P. Rakyta, G. Burkard, and V. I. Fal'ko Phys. Rev. B, 88, 045416 (2013).
[5] N. D. Mermin Phys. Rev. B, 1, 2362–2363 (1970).
[7] X. Liu, G. Zhang, Q.-X. Pei, and Y.-W. Zhang Appl. Phys. Lett., 103, 133113 (2013).
[8] G. Giuliani and G. Vignale, *Quantum Theory of the Electron Liquid* (Cambridge University Press, Cambridge, 2005).
[9]Paulo Andre Dias Concalves, *Plasmonics and Light-Matter Interactions in Two-Dimensional Materials and in Metal Nanostructures*(Springer Nature, 2020).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

ظرفیت گرمایی پارامگنون و توان حرارتی ناهنجار در فاز پارامغناطیس: اثر همبستگی اسپینی

حیدری نسب ، فاطمه[۱] ؛ جزندری، مرتضی[۲] ؛ پولاش، مبارک [۳،٤] ؛ ابویی، جهانفر[۲] ؛ وشایی، داریوش[۳،٤]

[۱] دانشکده علوم پایه دانشگاه سیستان و بلوچستان، خیابان دانشگاه، زاهدان

[۲] دانشکده فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، گاوازنگ، زنجان

[۳] دانشکده علوم مواد و مهندسی، دانشگاه کارولینای شمالی، کارولینای شمالی، آمریکا

[٤] دانشکده مهندسی برق و کامپیوتر، دانشگاه کارولینای شمالی، کارولینای شمالی، آمریکا

چکیده

طراحی مواد ترموالکتریک با کارایی بالا می‌تواند نقش مهمی در صرفه‌جویی انرژی و کاهش انتشار گازهای گلخانه‌ای داشته باشد. اخیراً در این حوزه مواد پارامگنون مورد توجه قرار گرفته‌اند. با این حال، هنوز قوانین حاکم بر استفاده از این مواد به طور کامل شناخته نشده‌اند. ظرفیت گرمایی پارامگنون‌ها، به دلیل رابطه ترمودینامیکی بین ظرفیت گرمایی و توان حرارتی، می‌تواند نقش اساسی ایفا کند. با استفاده از روش‌های میدان میانگین، موج اسپینی و میدان میانگین خوشه‌ای، نشان می‌دهیم که موج اسپینی باقیمانده، به دلیل نوسانات حرارتی اسپینی در خوشه‌هایی با همبستگی اسپینی بزرگ، می‌تواند به مقدار غیر صفر ظرفیت حرارتی پارامگنون منجر شود. . علاوه بر این، همبستگی‌های اسپینی بزرگ بین نزدیک‌ترین همسایه‌های لایه‌های مختلف منجر به ظرفیت گرمایی پارامغناطیسی غیرصفر، و در نتیجه نیروی حرارتی کششی غیر صفر در فاز بی نظم می‌شود. ظرفیت حرارتی پارامگنونی برآورد شده برای سیستم اسپین $S = 5/2$ با نتایج تجربی مطابقت دارد.

واژه‌های کلیدی: *ظرفیت گرمایی پارامگنون، توان حرارتی*

Paramagnon Heat Capacity and Anomalous Thermopower in Paramagnetic Phase: Effects of Spin Correlations

Fatemeh Heydarinasab,[1] Morteza Jazandari,[2] Mobarak Polash,[3,4] Jahanfar Abouie,[2] and Daryoosh Vashaee[3,4]

[1] *Department of Physics, Faculty of Science, University of Sistan and Baluchestan, Zahedan, Iran*
[2] *Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences (IASBS), Zanjan 45137-66731, Iran*
[3] *Department of Materials Science and Engineering, NC State University, Raleigh, NC 27606, US*
[4] *Department of Electrical and Computer Engineering, NC State University, Raleigh, NC 27606, US*

Abstract

The design of high-performance thermoelectric materials can play a critical role in energy-saving and reducing greenhouse gas emissions. Paramagnon materials have recently taken much attention as the basis of a new class of thermoelectric materials with great promise; however, there is still a lack of understanding at the fundamental level to define inclusive design rules. In this regard, the heat capacity of paramagnons can play a vital role due to the thermodynamic relationship between heat capacity and thermopower. Using the mean-field, spin-wave, and cluster mean-field methods, we show that the residual spin-wave, due to spin heat fluctuations in clusters with large spin correlations, can lead to a non-zero value of paramagnon heat capacity. In addition, large spin correlations between the closest neighbors of the different layers lead to a non-zero paramagnetic heat capacity; hence, a non-zero drag thermopower in the disordered phase. The estimated paramagnon heat capacity for the spin system $S = 5/2$ agrees with the experimental results.

***Keywords**: Paramagnon Heat Capacity, Thermopower*

مقدمه

اثرات ترموالکتریک اسپینی توجه زیادی را در حوزه‌ی انرژی-های سبز به خود جلب کرده است (۱و۲). مشاهدات اخیر توان حرارتی کششی پارامگنون–الکترون (PED)، امکان استفاده از مواد اسپینی را در طراحی دستگاه‌های ترموالکتریک با کارایی بالا نشان می‌دهد (۳–۵). پارامگنون‌ها بسته‌های کوانتیزه‌ی موج اسپینی باقیمانده در فاز پارامغناطیس هستند، که اگر طول همبستگی اسپینی بزرگتر از شعاع بوهر، و طول عمر پارامگنون بزرگتر از زمان واهلش

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مگنون-الکترون باشد، می‌توانند مانند مگنون عمل کنند (۳و۵). توان حرارتی کششی غیرصفر و طول عمر مگنون در فاز پارامغناطیس (PM) شاهد تجربی محکمی بر این مدعا است (۳و۵). اگرچه هنوز در مورد منشاء اصلی توان حرارتی اسپینی بزرگ در مواد پارامغناطیس اختلاف نظر وجود دارد (۵و۶)، اما به دلیل رابطه‌ی ترمودینامیکی توان حرارتی و ظرفیت گرمایی، این کمیت در تعیین رفتار توان حرارتی سیستم نقش به سزایی دارد (۵و۶). ظرفیت گرمایی تغییرات آنتروپی نسبت به دما است، در حالی که توان حرارتی ناشی از آنتروپی منتقل شده توسط حامل‌های بار است (۷و۸). بنابراین، از نظر مفهومی، پارامگنون‌ها باید در ظرفیت گرمایی اثرگذار باشند. ظرفیت گرمایی مغناطیسی غیرصفر بالاتر از دمای گذار در مواد مغناطیسی مختلف مشاهده شده است (۳و۹و۱۰). اما به ندرت پارامگنون‌ها به عنوان منشاء اصلی ظرفیت گرمایی پارامغناطیس در نظر گرفته می‌شوند. عوامل زیادی مانند تغییر انرژی آزاد مربوط به نظم-بی‌نظمی مغناطیسی، افت و خیز اسپینی بالای دمای گذار، سهم شاتکی، و سایر تغییرات فاز مرتبه دوم می‌توانند باعث ظرفیت گرمایی مغناطیسی غیرصفر بالای دمای گذار شوند (۱۰). همچنین، فقدان مدل‌سازی نظری درک سازوکار مشارکت آنتروپی پارامگنون‌ها در ظرفیت گرمایی را محدود می‌کند. در این مقاله، می‌خواهیم سهم پارامگنون‌ها در ظرفیت گرمایی را بیابیم. تجزیه و تحلیل دقیق رفتار ظرفیت گرمایی می‌تواند اطلاعاتی در مورد حضور حامل‌های آنتروپی مختلف ارائه دهد (۱۰-۱۳). برای این منظور با استفاده از نظریه میدان متوسط خوشه‌ای (CMF) افت و خیز گرمایی را که نقش حیاتی در ایجاد مگنون‌ها دارد (۳و۵و۱۰)، محاسبه می‌نماییم. این نتایج را با دیگر روش‌های متداول مانند میدان متوسط (MF) و موج اسپینی (SW) مقایسه می‌کنیم، و برای بررسی تأثیر اندازه‌ی خوشه‌ها بر ظرفیت گرمایی پارامگنون، نظریه CMF را با اندازه‌های مختلف خوشه در نظر می‌گیریم، که درک بهتری از اثر دینامیک اسپین در PED ارائه می‌دهد. همچنین ظرفیت گرمایی پارامگنون را با نتایج تجربی تلورید منگنز (MnTe) مقایسه می‌کنیم. MnTe به خاطر خواص ویژه‌ای که دارد، ماده‌ای منحصر به فرد برای بررسی PED است (۳و۵و۱۴)، و از جمله مواد مغناطیسی است که در آن مگنون‌ها در ظرفیت گرمایی مغناطیسی نقش دارند (۱۰و۱۵). ظرفیت گرمایی ویژه‌ی این ماده بیشینه‌ی تیزی در دمای T_N~307K دارد و به جای افت شدید، کاهشی تدریجی تا دمای ~600K نشان می‌دهد (۱۰و۱۲و۱۵). مطالعات قبلی ظرفیت گرمایی با استفاده از روش موج اسپینی در دماهای پایین تطابق بهتری را نشان می‌دهد. هرچند که به علت شکست نظم بلندبرد مغناطیسی در دماهای بالا، از مقدار واقعی انحراف دارد (۵و۱۶). بنابراین در این مقاله سعی می‌کنیم با روش‌های دیگر نقش پارامگنون‌ها در ظرفیت گرمایی غیرصفر MnTe بالای دمای گذار محاسبه کنیم.

معرفی مدل و نتایج

MnTe ماده‌ای آنتی فرومغناطیس (AFM) با اسپین S=5/2 است، که شامل سه نوع برهمکنش آنتی فرومغناطیس همسایه اول بین لایه‌های متفاوت $J_1 = 21.5\text{K}$، برهمکنش فرومغناطیس بین همسایه‌های اول داخل لایه $J_2 = -0.67\text{K}$ و برهمکنش آنتی فرومغناطیس همسایه دوم بین لایه‌های متفاوت $J_3 = 2.81\text{K}$ است (شکل ۱-آ) (۵و۱۷). با توجه به مقدار بزرگ برهمکنش J_1، در حل MF و CMF سیستم را به دو نوع لایه‌ی متفاوت تقسیم‌بندی و ظرفیت گرمایی ویژه را با رابطه‌ی $C_V = \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial T}$ محاسبه می‌نماییم. در حل MF برهم‌کنش اسپین‌های S_i و S_j را با رابطه‌ی $S_i.S_j = S_i.\langle S_j\rangle + S_j.\langle S_i\rangle - \langle S_i\rangle.\langle S_j\rangle$ تقریب می‌زنیم و زیرشبکه‌هایی مانند شکل (۱-ب) در نظر می‌گیریم، که در آن زیرشبکه‌های مختلف با شماره مشخص شده‌اند. بنابراین هامیلتونی بر ذره‌ی سیستم به صورت زیر است:

$$H_{MF} = J_1 \sum_{j=0}^{6} \left(\vec{S}_{o,j}.\vec{m}_{1,j} + \vec{S}_{1,j}.\vec{m}_{0,j}\right) + \frac{J_2}{2} \sum_{i=0}^{1} \sum_{\substack{j,k=0 \\ ,k\neq j}}^{6} \vec{S}_{i,j}.\vec{m}_{i,k} + J_3 \sum_{j,k=0,k\neq j}^{6} \left(\vec{S}_{o,j}.\vec{m}_{1,k} + \vec{S}_{1,j}.\vec{m}_{0,k}\right). \quad (1)$$

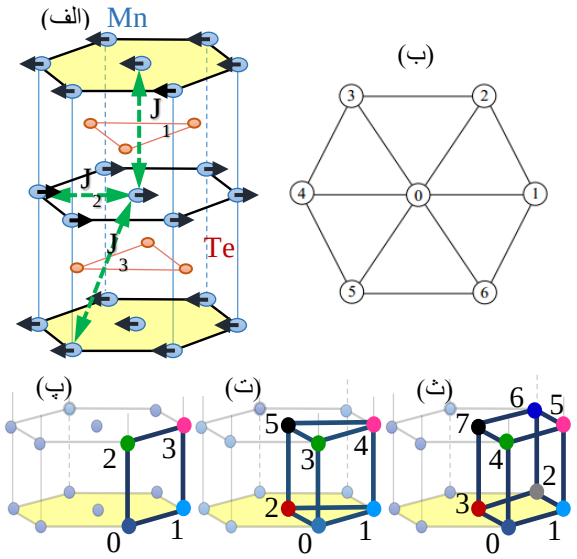
در این رابطه $\vec{m}_{i,j} = \langle \vec{S}_{i,j} \rangle_{MF}$ بردار مغناطش متوسط در لایه‌ی i ام و مکان j ام است، و جمع روی تمام زیرشبکه‌ها زده می‌شود. حل خودسازگار این رابطه انرژی MF و گرمای ویژه را نتیجه می‌دهد. روش CMF تعمیمی از روش MF است که به جای تقریب روی تک جایگاه‌ها از خوشه‌هایی شامل چند جایگاه استفاده می‌شود (۱۸-22). با حل دقیق برهم‌کنش‌های داخل خوشه و اعمال اثرات جایگاه‌های بیرون از خوشه به صورت میدان متوسط، می‌توان اثرات

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

افت و خیز کوانتومی و همبستگی‌های اسپینی را به حساب آورد (۲۱-۱۹). هامیلتونی در این تقریب به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$H_{CMF} = \sum_{c} H_c + h_{eff}, \qquad (2)$$

که در آن H_c (h_{eff}) برهم‌کنش‌های داخل (بین) خوشه‌ها هستند. حل خودسازگار این رابطه انرژی و ظرفیت گرمایی ویژه را نتیجه می‌دهد.

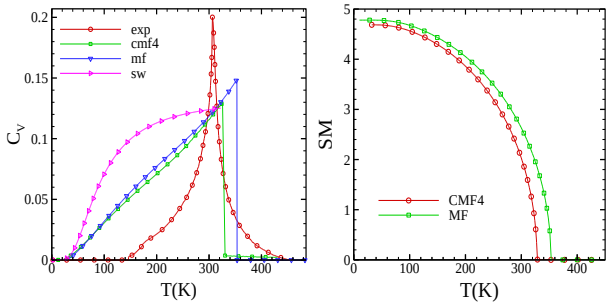


شکل ۱- (الف) ساختار MnTe. ب) پیکربندی ا سپینی در هر لایه با روش MF. پ، ت و ث) خوشه‌های چهار، شش و هشت اسپینی در روش CMF. برهمکنش‌های دقیق (متوسط) با خطوط پررنگ (کم رنگ) مشخص شده‌اند.

به علت برهم‌کنش فرومغناطیس J_2 خوشه‌های مختلفی مانند شکل ۱ در نظر گرفتیم، تا برهم‌کنش‌های آنتی فرومغناطیس سیستم را تا جای ممکن در محاسبات وارد کنیم. اندازه‌ی هامیلتونی‌های CMF به اندازه‌ی خوشه‌ها و همچنین اندازه‌ی اسپین بستگی دارد. با توجه به امکانات کامپیوتری توانستیم تا خوشه‌های چهار اسپینی را برای سیستم S=5/2 حل کنیم. اگرچه برای فهم رفتار کلی سیستم محاسبات را برای S=1 تا خوشه‌های هشت تایی ادامه دادیم.

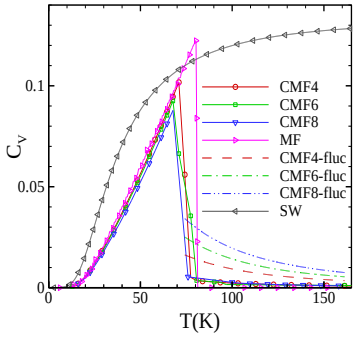
از آن جایی که جمله‌ی غالب برهم‌کنش آنتی فرومغناطیس بین لایه-ای است، حالت پایه‌ی سیستم فاز نیل با مغناطش متناوب بزرگ است (شکل ۲- راست). افت و خیز گرمایی پارامتر نظم را کاهش می‌دهد تا این فاز در دمای T_N از بین برود. نتایج CMF در مقایسه با نتایج MF دمای گذار را بهبود می‌بخشند. در شکل ۲- چپ ظرفیت گرمایی ویژه‌ی MnTe با روش‌های SW، MF و CMF رسم و با نتایج آزمایشگاهی مقایسه کردیم. طبق نتایج MF، C_V تا دمای گذار افزایش می‌یابد و در دمای گذار از بین می‌رود، و در مقایسه با نتایج آزمایشگاهی دمای گذار بالاتری را نشان می‌دهد. از طرف دیگر نتایج SW که تا حدودی افت و خیز کوانتومی را شامل می‌شوند، در دمای پایین تطابق بهتری دارند. هر چند که در دماهای بالاتر با از بین رفتن نظم بلندبرد اشباع می‌شوند و هیچ دمای گذاری را نشان نمی‌دهند. نهایتا، اگرچه نتایج CMF رفتاری مشابه MF تا دمای گذار نشان می‌دهند، اما ظرفیت گرمایی غیرصفری را در فاز پارامغناطیس نشان می‌دهند و افزودن افت و خیزهای کوانتومی دمای گذار را کاهش می‌دهد. چنان‌که افزودن این اثرات به ظرفیت گرمایی ویژه با استفاده از رابطه زیر مقدار ظرفیت گرمایی را افزایش می‌دهد:

$$C_{V,fluc} = \frac{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2}{k_B T^2} \qquad (3).$$



شکل ۲- راست) مغناطش متناوب MnTe با روش MF و CMF4. چپ) ظرفیت گرمایی محاسبه شده‌ی MnTe با روش MF، SW و CMF4. برای مقایسه نتایج آزمایشگاهی آورده شده است.

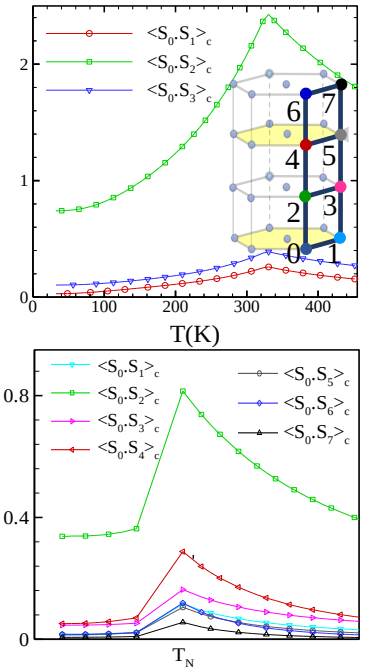
در مجموع، اگرچه هنوز نتایج CMF متفاوت از نتایج آزمایشگاهی است، اما این نتایج تقریبی بهتر و توصیف خوبی از اثر پارامگنون‌ها در ظرفیت گرمایی نشان می‌دهد.



شکل ۳- ظرفیت گرمایی سیستم اسپین ۱ با روش‌های MF، SW، CMF4، CMF6 و CMF8. برای محاسبه‌ی ظرفیت گرمایی در CMF از تغییرات انرژی نسبت به دما استفاده شده است. در حالی‌که در روش-های CMF4-، -6 و 8-fluc از رابطه‌ی ۳ استفاده شده است.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

انتظار می‌رود با افزودن افت و خیزها با کمک خوشه‌های بزرگتر رفتار C_V بهبود یابد، لذا این مدل را برای خوشه‌های شش (CMF6) و هشت (CMF8) اسپینی با S=1 حل کردیم (شکل ۳). با افزایش اندازه‌ی خوشه‌ها افت و خیزهای انرژی و در نتیجه ظرفیت گرمایی ویژه در فاز بی‌نظم افزایش می‌یابد. این موضوع به درک رفتار C_V در MnTe نیز کمک می‌کند.



شکل ٤- همبستگی اسپینی بین جایگاه‌های مختلف در بالا) MnTe و پایین) ساختار MnTe با اسپین ۱ و حل CMF8 با چینش جدید.

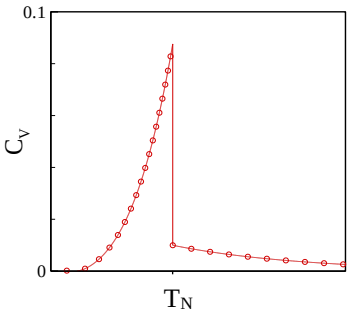
به نظر می‌آید افزایش ظرفیت گرمایی ویژه‌ی پارامگنون به اندازه‌ی خوشه‌ها و طول همبستگی اسپینی (رابطه‌ی ٤) بستگی داشته باشد.

$$\langle S_i.S_j\rangle_c = \langle S_i.S_j\rangle - \langle S_i\rangle.\langle S_j\rangle \qquad (4)$$

از آنجایی که بیشترین همبستگی بین نزدیک‌ترین همسایه‌های بین لایه‌ای وجود دارد (شکل ٤- بالا، نمودار سبز)، CMF8 را برای خوشه‌هایی در امتداد J_1 و اسپین S=1 تکرار و نتایج آن را در شکل ٤- پایین رسم کردیم. به طرز جالبی همبستگی‌های بین جایگاه‌ها در این راستا بیشتر از همسایه‌هایی با برهم‌کنش J_2 و J_3 است، حتی بین جایگاه‌هایی که به طور مستقیم در هامیلتونی برهم‌کنش ندارند. این موضوع رفتار ظرفیت گرمایی ویژه را نیز بهبود می‌بخشد (شکل ۵). بنابراین برهم‌کنش قوی آنتی فرومغناطیس روی رفتار ظرفیت گرمایی ویژه در نتایج آزمایشگاهی MnTe اثرگذار است.

نتیجه‌گیری

نتایج CMF درک بهتری از تاثیر پارامگنون‌ها در رفتار ظرفیت گرمایی ویژه ارائه می‌دهند و توافق خوبی با نتایج آزمایشگاهی MnTe دارند. به نظر می‌آید افت و خیزهای گرمایی اسپین‌ها در یک خوشه با طول همبستگی اسپینی کافی، منشأ فیزیکی ظرفیت گرمایی پارامگنون باشد. بنابراین، وجود پارامگنون در مواد مغناطیسی به اندازه‌ی خوشه‌ها و طول همبستگی اسپینی بستگی دارد.



شکل ۵- ظرفیت گرمایی سیتم اسپین ۱ روی ساختار MnTe و حل CMF8 با چینش جدید در امتداد برهمکنش J_1

مرجع‌ها

[1] J. He and T. M. Tritt, *Science*, **357**, eaak9997 (2017).
[2] M. Y. Kim, S. J. Park, G.-Y. Kim, S.-Y. Choi, and H. Jin**,** *Energy Environ. Sci.*, **14**, 3480-3491 (2021).
[3] Y. Zheng, T. Lu, M. M. H. Polash, M. Rasoulianboroujeni, N. Liu, M. E. Manley, Y. Deng, P. J. Sun, X. L. Chen, R. P. Hermann, D. Vashaee, J. P. Heremans, and H. Zhao, *Sci. Adv.*, **5**(9), eaat9461 (2019).
[4] M. M. H. Polash, F. Mohaddes, M. Rasoulianboroujeni, and D. Vashaee, *J. Mater. Chem. C*, **8**(12), 4049-4057 (2020).
[5] M. M. H. Polash, D. Moseley, J. Zhang, R. P. Hermann, and D. Vashaee, *Cell Reports Physical Science* (2021).
[6] P. Sun, K. R. Kumar, M. Lyu, Z. Wang, J. Xiang, and W. Zhang, *The Innovation*, 2, 100101 (2021).
[7] C. Goupil, W. Seifert, K. Zabrocki, E. Muller, and G. J. Snyder, *Entropy*, **13**, 1481-1517 (2011).
[8] A. P. Cracknell and A. O. Tooke, *Contemp. Phys.*, 20(1), 55-82 (1979).
[9] M. M. H. Polash and D. Vashaee, *Phys. Rev. B*, **102**(4), 045202 (2020).
[10] M. M. H. Polash, M. Rasoulianboroujeni, and D. Vashaee, *Appl. Phys. Lett.*, **117**(4), 043903 (2020).
[11] M. M. H. Polash and D. Vashaee, *Phys. Solidi Status Rapid Res. Lett.*, **15**, 2100231 (2021).
[12] M. M. H. Polash and D. Vashaee, *iScience*, accepted manuscript (2021).
[13] S. Stolen, F. Gronvold, and H. Brinks, *Phys. Rev. B*, **55**, 14103-14106 (1997).
[14] J. D. Wasscher and C. Haas, *Phys. Lett.*, **8**, 302–304 (1964).
[15] F. Gronvold, N. J. Kveseth, F. D. S. Marques, and J. Tichy, *J. Chem. Thermodynamics*, 4, 795-806 (1972).
[16] E. S. R. Gopal, *Specific Heats at Low Temperatures*, (Plenum Press, NY, 1966).
[17] W. Szuszkiewicz, E. Dynowska, B. Witkowska, and B. Hennion, Phys. Rev. B 73, 104403 (2006).
[18] T. Oguchi, *Progress of Theoretical Physics* **13**, 148 (1955).
[19] F. Heydarinasab and J. Abouie, *Journal of Physics: Condensed Matter* **32**, 165804 (2020).
[20] F. Heydarinasab and J. Abouie, *Scientific reports* **8**, 1 (2018).
[21] F. Heydarinasab and J. Abouie, *Phys. Rev. B* **96**, 104406 (2017).
[22] D. Yamamoto, *Phys. Rev. B* **79**, 144427 (2009).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

سطح مقطع تولید کوارک های سنگین در برهمکنش الکترون-پروتون در مرتبه NLO

زرین ، صلاح الدین ؛ دادفر، ساره

گروه فیزیک دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان

چکیده

در این مقاله ما قصد داریم که سطح مقطع کوارک های سنگین $\sigma^{c\bar{c}}$ ، $\sigma^{b\bar{b}}$ و $\sigma^{t\bar{t}}$ را در مرتبه NLO با استفاده از توزیع کوارکی ظرفیت و تابع توزیع گلوئون در برهمکنش الکترون- پروتون ارائه دهیم. برای این کار ما ابتدا با استفاده از توابع ساختار $F_{2,L}^{q\bar{q}}(x,Q^2)$، سطح مقطع کاهش یافته را برای کوارک های سنگین بدست می آوریم و سپس سطح مقطع کوراک های سنگین را ارائه می دهیم. نتایج بدست آمده برای سطح مقطع کوارک های افسون و ته را با داده های HERA که ترکیبی از نتایج آشکارساز های H1 و ZEUS می باشد، مقایسه می کنیم. همچنین در این کار، سطح مقطع کوراک سر را به عنوان یک پیشگویی از نتایج محاسباتمان ارائه می دهیم.

واژه های کلیدی: *سطح مقطع- کوارک های سنگین- گلوئون*

The heavy quarks production cross section in the electron-proton interaction at the NLO approximation

Zarrin, Salaheddin; Dadfar, Sareh

Department of Physics, University of Sistan and Baluchestan, Zahedan

Abstract

In this paper, we intend to present the heavy quarks production cross section $\sigma^{c\bar{c}}$, $\sigma^{b\bar{b}}$ and $\sigma^{t\bar{t}}$ in the electron-proton interaction by using the valence quarks and the gluon distribution functions. To do this, we first obtain the reduced cross section for the heavy quarks by using the structure functions, and then present the production cross section of the heavy quarks. We compare the numerical results of the cross section of the charm and bottom quarks with the HERA data, which is a combination from the results of the H1 and ZEUS detectors. We also present the top quark production cross section as a direct prediction from our calculations.

***Keywords**: Cross Section- Heavy Quark -Gluon*

PACS No. 14.65.Dw, 14.65.Fy, 14.65.Ha

مقدمه :

سهم کوارک های سنگین در فرایند لپتون- هادرون یکی از مهم ترین موضوعات کرومودینامیک کوانتومی در مقادیر کوچک از متغییر بیروکن x است. در کرومودینامیک کوانتومی در ناحیه ای که Q^2 خیلی بزرگتر از مربع جرم کوارک سنگین است، انتظار می رود که تولید کوارک های سنگین نسبت به اثرات آستانه حساس نباشد و کوارک ها ممکن است به عنوان پارتون های بدون جرم در نظر گرفته شود. در مرتبه اول اختلالی، فرایند مدل پارتونی کوارک سهم غالب را دارد و در مرتبه دوم اختلالی همجوشی گلوئون- فوتون و فرایند های کامپتونی کرومودینامیک کوانتومی سهم غالب را دارند [۱]. محاسبات نظری برای تولید جفت کوارک های سنگین در مرتبه اول و دوم اختلالی در HERA در دسترس می باشد. در x های کوچک در هر دو آشکار ساز H1 و ZEUS سطح مقطع های کاهش یافته $\sigma_r^{c\bar{c}}$ و $\sigma_r^{b\bar{b}}$ و مولفه های کوارک های افسون $F_2^{c\bar{c}}$ و ته $F_2^{b\bar{b}}$ تابع ساختار پروتون با انرژی مرکز جرم الکترون-پروتون $\sqrt{s}=318GeV$ داده شده است. نتایج

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

نشان داده اند تولید کوارک های سنگین در برهمکنش الکترون-پروتون (همانطور که گفته شد) به توزیع گلوئون و کسر تکانه مینیمم گلوئون x_g ($x_g^{tt} > x_g^{bb} > x_g^{cc}$) بستگی دارد و همینطور تولید این کوارک ها وابسته به جرم کوارک ها و مقیاس اختلالی μ می باشد. [۲]. ما در این مقاله قصد داریم با استفاده از روش لاپلاس که در چندین مقاله مختلف اعتبار آن سنجیده شده [۳]، معادلات تحولی DGLAP را حل کنیم و با استفاده از یک برازش مناسب، توابع ضریب کوارک های سنگین را بدست بیاوریم. با استفاده از تابع توزیع گلوئون (بدست آمده از حل معادلات DGLAP) و با استفاده توابع ضریب برازش شده توابع ساختار کوارک های سنگین را بدست می آوریم و نتیجتاً سطح مقطع کاهش یافته این کوراک ها را ارائه می دهیم. در انتها با استفاده از انتگرال گیری بر روی سطح مقطع کاهش یافته سطح مقطع کل را برای تولید کوارک های سنگین افسون، ته و بالا را ارائه می دهیم.

محاسبات

سطح مقطع دیفرانسیلی کوارک های سنگین بر حسب تابع ساختار کوارکهای سنگین $F_2^{q\bar{q}}$ و $F_L^{q\bar{q}}$ به صورت زیر می باشد:

$$\frac{d^2\sigma^{q\bar{q}}}{dxdQ^2} = \frac{2\pi\alpha^2}{xQ^4}\Big((1+(1-y)^2)F_2^{q\bar{q}}(x,Q^2) - y^2F_L^{q\bar{q}}(x,Q^2)\Big) \quad (۱)$$

در معادله بالا $y = \frac{Q^2}{xs}$ و $F_{2,L}^{q\bar{q}}$ توابع ساختار کوارک های سنگین می باشند که به صورت زیر وابسته به چگالی گلوئون می باشد:

$$F_{k,g}^{q\bar{q}}(x,Q^2,m_q^2) = x\,e_H^2\int_x^1 H_{k,g}(z,\xi) \times g(\frac{x}{z},\mu^2)\frac{dz}{z}, \quad k=2,L \quad (۲)$$

که در آن μ^2 مقیاس عاملبندی جرم، e_H بار کوارک سنگین، $\xi = \frac{Q^2}{m_q^2}$ و $\frac{1}{a} = z_{\max} = \frac{Q^2}{4m_q^2+Q^2}$ و همچنین $g(z,\mu^2)$ تابع چگالی گلوئون می باشند. در معادله (۲) ضریب $H_{k,g}$ به صورت زیر می باشد:

$$H_{k,g}(z,Q^2,\mu^2) = \sum_{i=1}^{\infty}\left(\frac{\alpha_s}{4\pi}\right)^i H_{k,g}^{(i)}(z,Q^2,\mu^2) \quad (۳)$$

در این معادله $H_{k,g}^{(i)}$، توابع ضریب در مراتب مختلف را نشان می دهد که با استفاده از کد های مختلف ارائه شده و در حدی طولانی هستند که ارائه آنها در مقاله امکان پذیر نمی باشد. این توابع ضریب در مرجع [٤] برای $Q^2 \gg m_q^2$ از طریق برازش بدست آمده است و برای $Q^2 \geq m_q^2$ و $Q^2 \leq m_q^2$ نتایج قابل قبولی را ارائه نمی دهند. ما با استفاده داده های HERA [٥و ٦و ٧]، نتایج مراجع [٨و ٩] و به کار بردن روش برازش لونبرگ-مارکوارت[۱] و نیوتن[۲] توانسته‌ایم ضرایب کنترلی را برای توابع ضریب (ارائه شده در مرجع [٤]) به گونه ای بدست بیاوریم که جواب های مناسبی را برای توابع ساختار کوارک‌های سنگین ارائه دهد. ضرایبی که کنترل کننده توابع ضریب در Q^2 های پایین می‌باشند دارای شکل کلی $a-e^{bQ^2}$ هستند که در جدول (۱) برای $H_{2,g}$ و $H_{L,g}$ و کوارک های مختلف داده شده است. برای حل معادله (۲) و بدست آوردن توابع ساختار کوارکی باید تابع توزیع گلوئون را بدست آوریم برای این کار ما از معادله DGLAP استفاده می کنیم که به صورت زیر می باشند[۱۳-۱۰]:

$$\frac{\partial F_s(x,Q^2)}{\partial \ln Q^2} = \frac{\alpha_s}{2\pi}\Big[P_{qq}(x,Q^2)\otimes F_s(x,Q^2) + 2n_f\,P_{qg}(x,Q^2)\otimes G(x,Q^2)\Big]$$
$$\frac{\partial G(x,Q^2)}{\partial \ln Q^2} = \frac{\alpha_s}{2\pi}\Big[P_{gq}(x,Q^2)\otimes F_s(x,Q^2) + P_{gg}(x,Q^2)\otimes G(x,Q^2)\Big] \quad (۴)$$

حالا با استفاده از تغییر متغیر $x \equiv e^{-v}$ ، $y \equiv e^{-w}$ و $\tau = \frac{1}{4\pi}\int_{Q_0^2}^{Q^2}\alpha_s(Q'^2)d\ln Q'^2$ و استفاده از تبدیل لاپلاس می توانیم معادلات بالا را از فضای ν به فضای s ببریم که به صورت زیر بدست می آید:

$$f^{(i)}(s,Q^2) = k_{ff}^{(i)}(s,\tau)f^{(i)}(s,Q_0^2) + k_{fg}^{(i)}(s,\tau)g^{(i)}(s,Q_0^2) \quad (۵)$$

$$g^{(i)}(s,Q^2) = k_{gf}^{(i)}(s,\tau)f^{(i)}(s,Q_0^2) + k_{gg}^{(i)}(s,\tau)g^{(i)}(s,Q_0^2) \quad (۶)$$

[۱] Levenberg–Marquardt

[۲] Newton

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

ضرایب $k^{(i)}$ (i=LO , NLO) را می توان در مرجع [۱۴] یافت.

حالا معادله (۲) را با استفاده از تغییر متغییر $x \equiv \frac{y}{a}$ به صورت زیر بدست می آید:

$$F_{k,g}^{q\bar{q}}(\frac{y}{a},Q^2,m_q^2)=e_H^2\int_y^1 K_{k,g}(\frac{y}{az},\xi) \times G(z,\mu^2)\frac{dz}{z},\quad k=2,L \qquad (۷)$$

که در معادله بالا $K_{k,g}(\frac{y}{az},\xi)=\frac{y}{az}H_{k,g}(\frac{y}{az},\xi)$. حالا با استفاده از تغییر متغییر $y \equiv e^{-v}$ ، $z \equiv e^{-w}$ می توانیم معادله بالا را به فضای s ببریم که به صورت زیر بدست می آید:

$$f_{k,g}^{q\bar{q}}(s,Q^2,m_q^2)=\frac{1}{a^s}e_H^2 g(s,\mu^2)k_{k,g}(s,\xi) \qquad (۸)$$

که در معادله بالا $k_{k,g}(s,\xi)=L\left(K\left(e^{-v+\ln 1/a}\right),v,s\right)$. برای بدست آوردن تابع ساختار کوارک های سنگین در فضای s باید معادله (۶) را در معادله (۸) قرار دهیم که به صورت زیر بدست می آید:

$$f_{k,g}^{q\bar{q}}(s,Q^2,m_q^2)=e_H^2\left[j_{gf}(s,M^2)f(s,Q_0^2) + j_{gg}(s,M^2 g(s,Q_0^2)\right],\quad k=2,L \qquad (۹)$$

که در معادله بالا ضرایب به صورت زیر می باشند:

$$j_{gf}(s,M^2)=h_{k,g}(s,\xi)k_{fg}(s,\tau(M^2,Q_0^2))/a_s^2$$
$$j_{gg}(s,M^2)=h_{k,g}(s,\xi)k_{gg}(s,\tau(M^2,Q_0^2))/a_s^2 \qquad (۱۰)$$

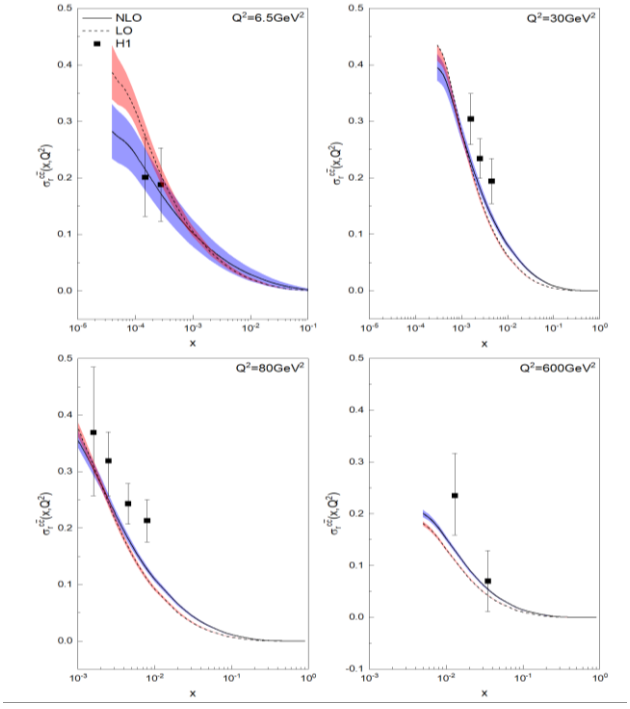
در انتها برای بدست آوردن تابع ساختار کوارکی در فضای x کافی است از معادله (۷) لاپلاس معکوس بگیریم و معادلات بدست آمده را در معادله (۱) قرار می دهیم. با این کار ابتدا سطح مقطع کاهش یافته را بدست ارائه می دهیم و در انتها با انتگرال گیری نسبت به Q^2 و x سطح مقطع کل کوارک های سنگین را می توانیم بدست آوریم.

نتایج عددی

در این بخش می خواهیم نتایج عددی سطح مقطع کاهش یافته و سطح مقطع تولید جفت کوارک های سنگین را ارائه بدهیم و آنها را با داده‌های تجربی ترکیب شده HERA [۲و۱] (که از آشکارسازهای H1 و ZEUS بدست آمده) مقایسه کنیم. برای بدست آوردن نتایج عددی ما جرم کوراک ها را به صورت $m_c = 1.29^{+0.077}_{-0.053}\ GeV$، $m_b = 4.^{+0}_{-0}\ 0.\ 4_1$ و $m_t = 173^{+3}_{-3} GeV$ و همچنین پارامتر قطع کرومودینامیک کوانتومی در مرتبه اول اختلالی را $\Lambda^{LO}_{n_f=4,5,6} = 0.192, 0.146, 0.11\ GeV$ و در مرتبه دوم اختلالی را $\Lambda^{NLO}_{n_f=4,5,6} = 0.269, 0.184, 0.12 GeV$ در نظر گرفته ایم.

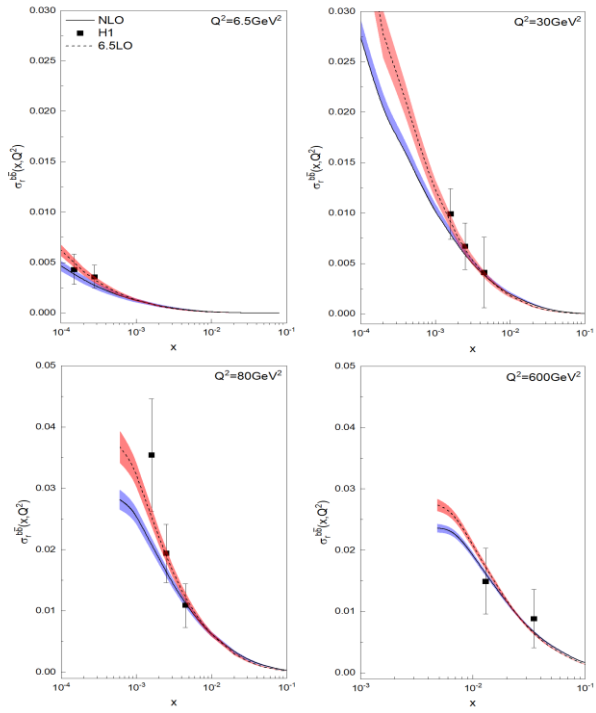
در شکل (۱) و (۲) و (۳) نتایج عددی مربوط به سطح مقطع کاهش یافته کوارک های افسون، ته و سر را در مقیاس $Q^2 = 6.5, 30, 80, 600 GeV^2$ نشان داده شده است که نتایج کوارک افسون و کوارک ته با داده های HERA [۲] مقایسه شده اند. همانطور که در شکل ها مشاهده می‌شود نتایج مرتبه دوم اختلالی می تواند نتایج سطح مقطع کاهش یافته را مقداری در x ها و Q^2 های بالا بهبود ببخشد. نوار های رنگی که در شکل ها مشاهده می شود ناشی از خطای جرمی کوارکی می باشد.

در جدول (۲) ما نتایج سطح مقطع کوارک های سنگین را در مقیاس $Q^2 > 150 GeV^2$ و در بازه $0.1 < y < 0.7$ با نتایج داده های HEAR مقایسه کرده ایم [۱]. همانطور که مشاهده می شود نتایج ما در مرتبه دوم اختلالی بسیار به داده های HEAR نزدیک است.



این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

شکل (۱) : سطح مقطع $\sigma_r^{c\bar{c}}(x,Q^2)$ در مرتبه اول و دوم اختلالی که تابع که با داده های HERA [۲] مقایسه شده است.



شکل(۲) : سطح مقطع کاهش یافته $\sigma_r^{b\bar{b}}(x,Q^2)$ در مرتبه اول و دوم اختلالی که با داده های HERA [۲] مقایسه شده است.

جدول (۱) : ضرایب موجود در تابع کنترل توابع ضریب کوارک های سنگین.

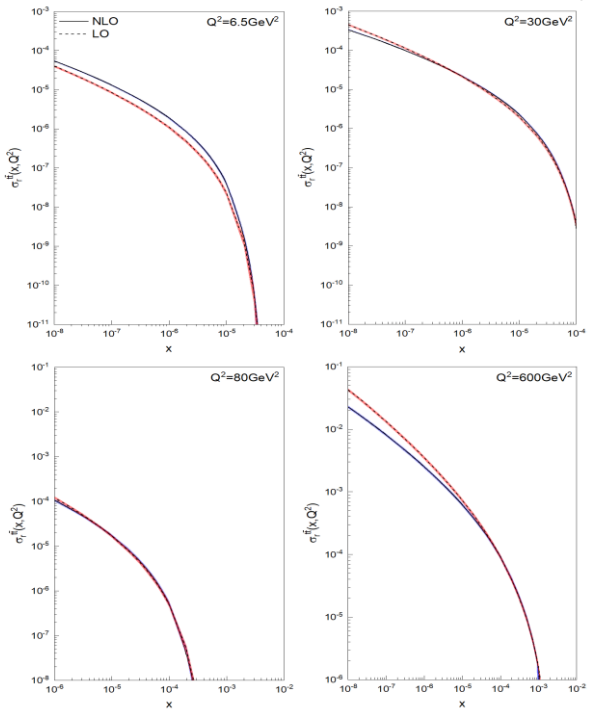
جرم کوارکی	a	b
$m_c\left(H_{2,g}\right)$	۱,۰۱۵۲۳۶۹	$-۱۱,۵۵٤۸\times۱۰^{-٤}$
$m_b\left(H_{2,g}\right)$	۱,۰۰۳٦٦۸۷	$-۲۳,۵۸٤۲\times۱۰^{-۵}$
$m_t\left(H_{2,g}\right)$	۱,۰۰۰۰۱۱	$-۸,۹۳٦۹۷\times۱۰^{-۸}$
$m_q\left(H_{L,g}\right)$	۰,۹٤۷۲۳۲	$-m_q^2$ ۷۱,۰۸۰۷$\times۱۰^{-۳}$

جدول(۲): نتایج سطح مقطع کوارک های سنگین را در مقایس $Q^2>150GeV^2$ و در بازه $0.1<y<0.7$ نتایج بر حسب pb است.

	LO	NLO	Ref. [۱]
$\sigma^{c\bar{c}}$	۳۸۵,۵۱	۳۹۷,۵۷	۳۷۳±۴۷±۳۹
$\sigma^{b\bar{b}}$	۵۲,۳۶	۵۷,۵۴	۵۵,۴±۸,۷±۱۲
$\sigma^{t\bar{t}}$	۰,۰۳۰۷	۰,۰۳۹۵	---

نتیجه گیری

ما در این مقاله با استفاده از روش لاپلاس و معادلات تحولی DGLAP و همچنین با به کار بردن یک برازش مناسب از توابع ضریب کوارک های سنگین توانستیم سطح مقطع کوارک های سنگین افسون و سر را بدست آوریم. در انتها آنها را با نتایج HERA مقایسه کنیم همچنین یک پیشبینی برای سطح مقطع کوارک سر ارائه بدهیم.



شکل۳ : سطح مقطع کاهش یافته $\sigma_r^{t\bar{t}}(x,Q^2)$ در مرتبه اول و دوم اختلالی.

مرجع‌ها

[۱] A. Aktas, et al. Eur. Phys. J. C, 40(3), 349 (2005).

[۲] H Abramowicz, et al. JHEP 09, 1 (2014).

[۳] J. Sheibani, A. Mirjalili, S. Atashbar Tehrani, Phys. Rev. C 98, 045211 (2018); M. M. Block, Eur. Phys. J. C 68, 683 (2010); M.M. Block et al., Phys. Rev. D 83.5 (2011).

[٤] M. Buza, Y, Smith J, Migneron R, Van Neerven WL. Nuclear Physics B. 1996 472, 611-58 (3).

[۵] C. Adlo et al. [H1 Collaboration], Z. Phys. C72, 593 (1996); C. Adlo et al. [H1 Collaboration], Phys. Lett. B528, 199 (2002); S. Aid et al. [H1Collaboration], Z. Phys. C72, 539 (1996);

[٦] H. Abramowicz et al. JHEP 2014, no. 9 (2014): 1-56.

[۷] A. Aktas et. al., [H1 Collaboration], Eur. Phys. J. C40,

[۸] G.R. Boroun, Phys. Lett. B 741 (2015) 197-201; G.R. Boroun, Phys. Lett. B 744 (2015): 142-145.

[۹] S.J. Brodsky, arXiv:1106.5820 [hep-ph], 2011; A. Cooper Sarkar, arXiv:1310.0662 [hep-ph], 2013.

[۱۰] V.N. Gribov, Lipatov LN, Inst. of Nuclear Physics, Leningrad (1972) .

[۱۱] V.N. Gribov, L.N. Lipatov, Yadern. Fiz. 15(6) 1218-37(1972).

[۱۲] Y.L. Dokshitzer. Zh. Eksp. Teor. Fiz. Jan 1;73(1216) 26 (1977).

[۱۳] Y. Lipatov, Fiz. 20, 181 (1974).

[۱٤] S. Zarrin, Dadfar S. IJTP 60(10), 3822-49 (2021).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

نسبت شاخه ای واپاشی مزون B_S به $X(3872)$ و $\varphi(1020)$ در تقریب فاکتورکردن

پرخاری، مائده؛ سیاحی، محبوبه؛ زرین، صلاح الدین؛ دادفر، ساره

گروه فیزیک، دانشگاه سیستان و بلوچستان

چکیده

در این مقاله دامنه واپاشی دو جسمی مزون B_s^0 به مزون برداری $\varphi(1020)$ و تتراکوارک $X(3872)$ را مورد مطالعه قرار می‌دهیم. بدین منظور از روش عاملبندی ساده برای محاسبه ضرایب موثر ظاهر شده در دامنه، استفاده می شود و دامنه های هلیسیته های مختلف با درنظر گرفتن قطبش برای مزون X در حالت 1^{++} محاسبه می گردد. نرخ شاخه ای واپاشی $B_s^0 \to X(3872)\varphi$ با این روش مقدار $(1.80 \pm 0.01) \times 10^{-3}$ بدست آمد. بعلاوه آهنگ واپاشی رزونانس $X(3872)$ به حالت های نهایی $J/\psi\,\pi^+\pi^-$ و $J/\psi\,K^+$ نیز تخمین زده شد. نتایج عددی محاسبات ما در توافق خوبی با داده های آزمایشی CMS می‌باشد.

واژه های کلیدی: *نرخ شاخه‌ای، تتراکوارک X، روش عاملبندی، واپاشی B_s*

Branching ratio of B_s^0 decay to X(3872) and $\varphi(1020)$ within factorization approach

Parkhari،maede؛sayahi،mahboobe؛salaheddin،zarrin؛dadfar،sareh

Department of Physics, University of Sistan and Baluchestan

Abstract

In this paper, we study the amplitude of two-body decay of B_s^0 to the vector meson $\varphi(1020)$ and $X(3872)$. For this aim, the naïve factorization approach is used to calculate the effective coefficients appeared in amplitude and the amplitude for the different helicities is calculated by considering four-vector polarization for X meson in 1^{++} state. In this method, the branching ratio of $B_s^0 \to X(3872)\varphi$ decay is obtained $(1.80 \pm 0.01) \times 10^{-3}$. Furthermore, we estimate the decay ratio of $X(3872)$resonance into final states $J/\psi\,\pi^+\pi^-$ and $J/\psi\,K^+$. Our numerical result is in well agreement with CMS collaboration data.

Keyword: *branching ratio, tetraquark X, factorization approach, B_s decay.*
PACSNo: 12.39.−x, 13.20.He, 12.15.−y.

مقدمه

عمومی ترین روش پدیدارشناسی برای بررسی خواص واپاشی های مختلف مزون B روش فاکتوری کردن است که در آن از طریق گذار $b \to c\bar{c}s$ در مدل کوارکی، مزون B_s قادر به واپاشی به مزون های φ و تتراکوارک چارم پنهان $X(3872)$ می‌باشد . کشف ذره رزونانس X(3872) عصر جدیدی در فهم طیف و ساختار شبه کوارکونیوم ها ایجاد کرده است. مزون $X(3872)$ ترکیبی از $c\bar{c}d\bar{d}(u\bar{u})$ می باشد که در حالت عدد کوانتومی $J^{PC} = 1^{++}$ اندازه گیری شده است [۱]. در سال 2020 اولین مشاهدات تجربی واپاشی $B_s^0 \to X(3872)\varphi$ گزارش شده است [2].

با بررسی فرایند واپاشی ضعیف B_s^0 و مقایسه نرخ‌های شاخه‌ای $\mathrm{Br}(B \to X(3872)h)$ ، که در آن h نشان دهنده هادرون سبک است، اطلاعات مهمی در مورد تولید X(3872) می‌توان استخراج کرد.

از حیث نظری مزون رزونانس X کانال‌های واپاشی ضعیف زیادی دارد که یکی از محصولات آن تولید حالت سه ذره ای $J/\psi\,\pi^+\pi^-$ می‌تواند باشد. برای توضیح نحوه تولید و تعیین ساختار این ذرات

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مدل‌های مختلفی مانند مدل کوارکی، ساختارهای تتراکوارکی و تعبیرهای مولکولی ارائه شده است. یک روش متداول بررسی واپاشی غیرلپتونی مزونهای B ، روش عاملبندی QCD می باشد که در توضیح نرخ شاخه‌ای بسیاری از واپاشی‌ها موفق عمل کرده است. در این مقاله با استفاده از مدل کوارکی در روش عاملبندی کردن برای بررسی نرخ واپاشی هادرونی دوجسمی $B_s^0 \to X(3872)\varphi$ از هامیلتونی موثر بهره گرفته‌ایم [3]. در این کانال واپاشی، کوارک b می‌تواند به دو کوارک c و u (d) واپاشی کند و کوارک c دیگری به عنوان تماشاگر به مجموعه اضافه می‌گردد.در انتها با در نظر گرفتن X به عنوان ذره میانی، واپاشی این ذره به $J/\psi\,\pi^+\pi^-$ و به عبارتی نرخ شاخه ای $BR(X(3872) \to J/\psi\,\pi^+\pi^-)$را نیز بدست می آوریم و با داده‌های تجربی CMS [2] مقایسه می‌کنیم.

حل تحلیلی:

هامیلتونی موثر H_{eff} در گذار $B_s^0 \to X(3872)\varphi$ به صورت زیر نوشته می شود[4]:

$$H_{eff} = \frac{G_F}{\sqrt{2}}(V_{cb}V_{cs}^*(c_1O_1 + c_2O_2) + V_{tb}V_{ts}^* \textstyle\sum_{i=3}^{10} c_iO_i), \quad (1)$$

که درآن، i و j اندیس های رنگ SU(3) ، C_i ضرایب ویلسون؛ $V_{cb}V_{cs}^*$و $V_{tb}V_{ts}^*$ ضرب عناصر ماتریس CKM و G_F ثابت فرمی می باشند. عملگرهای O_i در H_{eff} شامل عملگرهای موضعی جریان جریان از سطح درختی، پنگوئنی QCD و پنگوئنی الکتروضعیف هستند.

برای به دست آوردن دامنه ی واپاشی، هامیلتونی موثر را روی حالات نهایی اثر می دهیم. دامنه‌ی واپاشی غیرلپتونی B_s^0 شامل عناصر هادرونی ماتریس $\langle M_1M_2|O_i|B_S\rangle$ است که از روش عاملبندی کردن برای محاسبه آنها استفاده شده است. این روش، عناصر ماتریسی را با ضرب عنصر ماتریس گذار مزون B به یک مزون نهایی، که کوارک ناظر مشترک با هم دارند، و عنصر ماتریسی تولید مزون نهایی دیگر از خلاء ، تقریب می‌زند. عملگرهای چهار کوارکی O_i، با فرض یک حالت خلاء، به ضرب دو عنصر ماتریسی از جریان دو کوارکی عامل می‌شوند که حاصل آن متناسب با عامل شکل گذار ضعیف و ثابت واپاشی است.

$$\langle M_1M_2|O_i|B\rangle = \langle M_1|J_1^\mu|0\rangle\langle M_2|J_{\mu 2}|B\rangle \propto f_{M_1}F^{B\to M_2} \quad (2)$$

که $J_{\mu i}$جریان گذار $\bar{q}_i\gamma_\mu(1-\gamma_5)q_j$ می‌باشد و q کوارک ظرفیت در مزون‌ها می‌باشد. M_1 و M_2 حالت های مربوط به مزون های تولید شده هستند و O_i ها نیز عملگرها می باشند [5].

مطابق شکل ۱-۱ واپاشی $\boldsymbol{B_s^0 \to X(3872)\varphi}$ با یک گذار $\boldsymbol{B_s^0 \to \varphi}$ به همراه $\boldsymbol{X(3872)}$ پس زده، با عناصر ماتریسی $\boldsymbol{\langle X(3872|\bar{c}\gamma_\mu(1-\gamma_5)c|0\rangle}$ بیان می شود.

در واپاشی مدل کوارکی $\boldsymbol{b \to c\bar{c}s}$ ، با تبادل کوارک ناظر s با کوارک b و کوارک s از راس ضعیف، گذار عامل شکل مزون $\boldsymbol{B_S}$ به $\boldsymbol{\varphi}$ را در این تقریب با توجه به عملگر جریان کوارکی $\boldsymbol{\bar{c}\gamma_\mu(1-\gamma_5)b}$ خواهیم داشت. از طرفی حالت $\boldsymbol{c\bar{c}}$ از جریان $\boldsymbol{\bar{c}\gamma_\mu\gamma_5 c}$ منجر به تولید مزون‌های چارم می‌گردد. در اینجا ما با درنظر گرفتن کوارک تماشاگر $\boldsymbol{q\bar{q} = u\bar{u}, d\bar{d}}$ در مجاورت $\boldsymbol{c\bar{c}}$ ناشی از جریان ضعیف، تولید مزون شبه چارمونیوم $\boldsymbol{X(3872)}$ در واپاشی مزون $\boldsymbol{B_s^0}$ را بررسی کرده‌ایم. مقادیر عناصر ماتریسی را به صورت عامل‌های شکل گذار $\boldsymbol{B_s^0 \to \varphi}$ و ثابت واپاشی، به صورت زیر می نویسیم:

$$\langle\varphi(p_1,\varepsilon_1)|\bar{c}\gamma_\mu(1-\gamma_5)b|B_s(p_B)\rangle = \epsilon_{\mu\nu\alpha\beta}\varepsilon_1^{\nu*}p_B^\alpha p_\varphi^\beta \frac{2V^{B\varphi}(q^2)}{m_B+m_\varphi}$$
$$-i\Big[\Big(\varepsilon_{1\mu}^* - \frac{\varepsilon_1^*.q}{q^2}\Big)(m_B+m_\varphi)A_1^{B\varphi}(q^2) + 2m_\varphi\frac{\varepsilon_1^*.q}{q^2}q_\mu A_0^{B\varphi}(q^2) -$$
$$\Big[(p_B+p_\varphi)_\mu - \frac{m_B^2-m_\varphi^2}{q^2}q_\mu\Big](\varepsilon_1^*.q)\frac{A_2^{B\varphi}(q^2)}{m_B+m_\varphi}\Big],$$
$$\langle X(3872)|\bar{c}\gamma_\mu\gamma_5 c|0\rangle = m_X f_X \varepsilon_2^*. \quad (3)$$

که $q = p_B - p_1$ است. $(\varepsilon_1,\varepsilon_2)$ و (p_1,p_2) به ترتیب چار بردارهای قطبش و تکانه‌ی مزون‌های (φ,X) هستند و A_1A_0,A_2,V عامل‌های شکل گذار $B_s^0 \to \varphi$ درمقیاس m_x^2 هستند و p_B چاربردار تکانه مزون B است.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

درچارچوب سکون مزون B_s^0 ، از آنجاییکه مزون B_s^0 دارای اسپین صفر است، دومزون برداری در حالت نهایی دارای هلیسیته های یکسان هستند. از اینرو امکان سه حالت قطبش وجود دارد، یک حالت طولی و دو حالت عرضی که منطبق با هلیسیته‌های $\lambda = 0$ و $\lambda = \pm 1$ می باشد[8]. برای این دسته واپاشی های مزون B که حالت نهایی شامل دو مزون برداری است، دامنه‌های هلیسیته جداگانه محاسبه می‌گردند. رابطه دامنه برای هلیسیته‌های λ برای واپاشی $B_s^0 \to X(3872)\varphi$ را به صورت زیر داریم:

$$A^{\lambda=0,\pm}(B_s^0 \to X(3872)\varphi) = \frac{G_F}{\sqrt{2}} V_{bc}V_{CS}^* a_2 X^{\lambda=0,\pm}$$
$$= \frac{G_F}{\sqrt{2}} V_{bc}V_{CS}^* a_2 f_x m_x (\varepsilon_1^*.\varepsilon_2^*)((m_B+m_\varphi)A_1^{B\varphi}(q^2) -$$
$$(\varepsilon_1^*.p_B)(\varepsilon_2^*.p_B)\frac{2A_2^{B\varphi}(q^2)}{m_B+m_\varphi} +$$
$$i\varepsilon_{\mu\nu\alpha\beta}\varepsilon_2^{*\mu}\varepsilon_1^{*\nu}p_\beta^\alpha p_1^\beta \frac{2V^{B\varphi}(q^2)}{m_B+m_\varphi}),$$

(۴)

که در این معادله a_2 ضریب موثر از ترکیب ضرایب ویلسون در مرتبه LO به صورت زیر است:

$$a_2 = c_2 + \frac{c_1}{N},$$

(۵)

مقدار $N = 3$ عدد رنگ و ضرایب ویلسون در مقیاس $\mu = m_b$ برابرند با[9]:

$$c_1 = 1.82,\ c_2 = -0.185.$$

(۶)

دامنه‌های فاکتورپذیر $X^{\lambda=0,\pm}$ که از ترکیب دو عنصر ماتریسی ثابت واپاشی و عامل‌های شکل به دست آمده است، برای هلیسیته صفر به صورت:

$$X^0 = \frac{if_X}{2m_\varphi}[(m_B^2 - m_\varphi^2 - m_X^2)(m_B + m_\varphi) \times$$
$$A_1^{B\varphi}(m_X^2) - \frac{4m_B^2 p_c^2}{m_B+m_\varphi} A_2^{B\varphi}(m_X^2)],$$

(۷)

و برای هلیسیته های عرضی $\lambda = \pm$ مطابق رابطه (۸) بدست آمد

$$X^\pm = if_X m_X[(m_B + m_\varphi)A_1^{B\varphi}(m_X^2)$$
$$\mp \frac{2m_B p_c}{m_B + m_\varphi} V^{B\varphi}(m_X^2).$$

(۸)

در انتها برای محاسبه نرخ شاخه‌ای بایستی مربع دامنه‌ها با هلیسیته-های متفاوت را جمع بزنیم.

$$Br\left(B_s^0 \to X(3872)\varphi\right) =$$
$$\frac{p_c \tau_{B_s}}{16\pi m_{B_s}^2}\left(|A^{\lambda=0}|^2 + |A^{\lambda=+}|^2 + |A^{\lambda=-}|^2\right)$$

(۹)

که p_c تکانه مرکز جرم واپاشی است:

$$p_c = \frac{1}{2m_B}\sqrt{[m_B^2 - (m_\varphi + m_X)^2][m_B^2 - (m_\varphi - m_X)^2]},$$

(۱۰)

در واپاشی بررسی شده تکانه را به صورت $p_B = p_1 + p_2$ داریم. در چارچوب سکون مزون B ، $\overrightarrow{p_1} = -\overrightarrow{p_2}$. حال اگر $\overrightarrow{p_2}$ را در جهت مثبت z انتخاب کنیم، چاربردارهای قطبش برای هلیسیته‌های $\lambda = 0,\pm 1$ را به صورت زیر خواهیم داشت [10]:

$$\varepsilon_1^{0\mu} = \frac{p_1^\mu}{m_x},$$
$$\varepsilon_2^{0\mu} = \frac{p_2^\mu}{m_\varphi},$$
$$\varepsilon_1^{\mp\mu} = \varepsilon_2^{\pm\mu} = \frac{1}{\sqrt{2}}(0,\pm 1,i,0).$$

(۱۱)

نتایج عددی و تجربی

به منظور بدست آوردن نتایج عددی از نرم افزار متمتیکا و پکیج Feyncal استفاده نمودیم. در محاسبات عددی، از مقادیر زیر استفاده شده است [1و12]:

$$m_{B_s} = 5366.88 \pm 0.14 MeV,$$

$$\tau(B_s) = (1.515 \pm 0.004) \times 10^{-12} s,$$

$$f_X = (234 \pm 52) MeV,$$

$$m_X = 3871.69 \pm 0.17 MeV,$$

$$m_\varphi = 1019.461 \pm 0.016 MeV,\ V_{cb}V_{cs}^* = 0.039,$$

$$G_F = 1.166 \times 10^{-5}.$$

رابطه مربوط به وابستگی عامل های شکل به q^2 در مرجع [12] ارائه شده است:

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$$F(q^2) = \frac{r}{1-q^2/m_{fit}^2},$$

(۱2)

که در آن r و m_{fit} در جدول ۱ آورده شده است.

داده‌های آزمایشی CMS [2] نرخ شاخه‌ای

$$Br(B_s^0 \to X(3872)\varphi)Br(X(3872) \to J/\psi\,\pi^+\pi^-)$$

را در گستره 3.55×10^{-6} تا 5.27×10^{-6} گزارش کرده‌اند.

همچنین

$$Br(B^+ \to X(3872)K^+)Br(X(3872) \to J/\psi\,\pi^+\pi^-)$$

معادل $(8.6\pm0.8)\times10^{-6}$ اندازه گیری شده است و نسبت شاخه ای $\frac{Br(B^+\to X(3872)K^+}{Br(B_s^0\to X(3872)\varphi)}$ را تقریبا 2 بدست آورده‌اند.

	F(0)	r	m_{fit}^2
$V^{B_s\varphi}$	0.434	-1.049	39.52
$A_0^{B_s\varphi}$	0.474	-2.835	31.57
$A_1^{B_s\varphi}$	0.311	0.308	36.54
$A_2^{B_s\varphi}$	0.232	0.288	48.94

جدول ۱: عامل شکل گذار $B_s \to \varphi$ به روش LCSR [۱۱]

در این مقاله از نسبت شاخه‌ای واپاشی ذره B^+ ارائه شده در مرجع [2] بهره گرفته‌ایم. از محاسبات عددی ما، مقدار نرخ شاخه‌ای برای واپاشی $B_s \to X(3872)\varphi$ معادل $(1.80 \pm 0.01) \times 10^{-3}$ حاصل شد و همچنین نرخ شاخه‌ای

$$Br(X(3872) \to J/\psi\,\pi^+\pi^-) = (2.45 \pm 0.31) \times 10^{-3}$$

و

$$Br(X(3872) \to J/\psi\,\pi^+\pi^-)Br(B_s^0 \to X(3872)\varphi) = (4.41^{+0.32}_{-0.30}) \times 10^{-6}$$

بدست امد. در محاسبات ما عدم قطعیت‌ها، ناشی از جرم مزونها می باشد. با استفاده از نتایج بدست آمده در کار حاضر و اندازه‌گیری های ارائه شده در مرجع [2]، توانستیم نرخ‌های شاخه‌ای

$$Br(B^+ \to X(3872)K^+) = (3.73 \pm 0.51) \times 10^{-3}$$

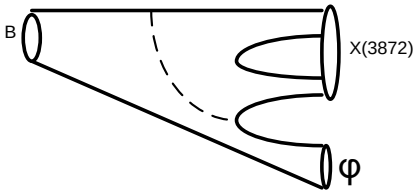
و

$$Br(B^+ \to X(3872)K^+)BR(X(3872) \to J/\psi\,\pi^+\pi^-) = (9.04 \pm 1.40) \times 10^{-6}.$$

را نیز پیش‌بینی کنیم.

نتیجه گیری:

در این تحقیق دامنه واپاشی دو جسمی مزون B_s^0 به مزون برداری $\varphi(1020)$ و تتراکوارک $X(3872)$ از روش عاملبندی ساده و محاسبه دامنه‌های هلیسیته‌های مختلف با درنظر گرفتن قطبش برای مزون X در حالت 1^{++} محاسبه شد [1،6،7]. از آنجاییکه مزون X به عنوان یک رزونانس در واپاشی‌ها رفتار می‌کند، می‌تواند به عنوان ذره میانی در واپاشی $X(3872) \to J/\psi\,\pi^+\pi^-$ در نظر گرفته شود [11]. مقایسه نتایج نشان می‌دهد که بکارگیری تقریب عاملبندی خام و درنظر گرفتن سهم قطبش مزونها در دامنه واپاشی رویکرد مناسبی است که منجر به همخوانی محاسبات ما با داده‌های ازمایشی CMS گردید[2].



شکل۱: نمودار فاینمن واپاشی $B_s \to X(3872)\varphi$

مراجع:

[1] Y. K. Hsiao and C. Q. Geng, "Branching Fractions of B_c Decays Involving J/ψ and X(3872)" , *Chinese Physics C*41 (2017) 013101.
[2] Belforte, S., V. Candelise, M. Casarsa, A. Da Rold, G. Della Ricca, and F. Vazzoler. "Observation of the B_s^0-> X (3872) φ decay." (2020) 1-18
[3] G. Buchalla, A. J. Buras, and M. E. Lautenbacher, "Weak decays beyond leading logarithms", Rev. Mod. Phys. 68, 1125 (1996).
[4] M. Beneke and L. Vernazza, "$B \to X_{cJ}K$ Decays revisited", *Nucl. Phys. B* 811 (2009) 155–181.
[5] Stefan W. Bosch, "Exclusive Radiative Decays of B Mesons in QCD Factorization" Max-Planck-Institut f¨ur Physik. MPI-PHT-2002-35, June (2002).
[6] X. Liu and Y. M. Wang, "Revisiting $B^+ \to X(3872)K$ in pQCD assigning to X(3872) 2^3P_1 charmonium" , *Eur. Phys. J. C*49 (2007) 643.
[7] W. Wang and Y. L. Shen and C. D. Lu, "Study of $B_c \to X(3872)\pi(k)$ Decays in the Covariant Light-Front Approach" , *Eur. Phys. J. C* 51 (2007) 841.
[8] Y. D. Yang and R. Wang and G. R. Lu, "Polarizations in Decays $B_{u,d} \to VV$ and Possible implications for R-parity Violating SUSY" , *Phys. Rev. D*72 (2005) 015009.
[9] T. Muta and A. Sugamoto and M. Z. Yang and Y. D. Yang ,"$B \to \pi\pi, K\pi$ Decays in the QCD Improved Factorization Approach" , *Phys. Rev. D*62 (2000) 094020.
[10] M. Beneke and J. Rohrer and D. Yang, "Branching Fractions, Polarization and Asymmetries" , *Nucl. Phys. B*774 (2007)64-101.
[11] P. A. Zyla et al (PDG), "Particle Physics Booklet" , *Prog. Theor. Exp. Phys.* 2020 (2020) 083C01.
[12] P. Ball and R. Zwicky, "$B_s \to \rho, \omega, K^*, \varphi$ Decays Form Factors from Light-Cone Sum Rules Revisited" , *Phys. Rev. D*71 (2005) 014029.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی عملکرد چیدمان کرچمن و تشدید پلاسمون سطحی برای کاربرد حسگری

رحیم‌آبادی، زهره؛ مرادی، مهرداد؛ آیاره، زهره

پژوهشکده علوم و فناوری نانو، دانشگاه کاشان، کاشان، ایران

چکیده

حسگرهای مبتنی بر تشدید پلاسمون سطحی یکی از پیشرفته‌ترین تکنولوژی‌های آشکارسازی بدون برچسب و بلادرنگ در سنجش‌های بیوزیستی می‌باشد. در این مقاله، با کمک روش بررسی زاویه‌ای بر اساس چیدمان کرچمن، حسگر تشدید پلاسمونی سطحی بر اساس ساختار منشور- لایه نازک طلا- گلوکز طراحی شد. ابتدا بازتاب برای ساختارکرچمن و مرز بین لایه های طلا- هوا اندازه‌گیری و کمینه بازتاب در زاویه ٤٦ درجه اندازه گیری شد. سپس یک قطره گلوکز با غلظت ۰/۰۱ مولار بر روی طلا ریخته و بازتاب در زوایای مختلف اندازه‌گیری شد که دو دره برای حالت تجربی مشاهده شد. سپس ساختار با استفاده از روابط تئوری و با کمک نرم افزار متلب شبیه‌سازی و با نتایج تجربی مقایسه شدند که همخوانی قابل قبولی را برای این حسگر نشان داد.

واژه‌های کلیدی: *تشدید پلاسمون سطحی، چیدمان کرچمن، لایه نازک طلا، گلوکز .*

Investigation the performance of Kretschmann configuration and surface plasmon resonance for sensor application

Rahimabadi, Zohreh; Moradi, Mehrdad; Ayareh, Zohreh

Institute of Nanoscience and Nanotechnology, University of Kashan, Kashan, Iran

Abstract

Sensors based on the surface plasmon resonance are one of the most advanced real-time unlabeled detection technologies in biosensors. In this paper, a surface plasmon resonance sensor is designed based on the Kretschmann configuration using prism-gold-glucose structure by angular variation method. Firstly, the reflectance was measured for the Kretschmann structure and the boundary between the gold-air layers, and the minimum reflectance was measured at an angle of 46 degrees. Then a drop of glucose with a concentration of 0.01 M was poured on the gold and the reflection was measured at different angles, and two valleys were observed for the experimental mode. Then the structure was simulated using theoretical relations with the help of MATLAB software and compared with experimental results which showed acceptable consistency for this sensor.

***Keywords**: Surface Plasmon Resonance, Kretschmann configuration, Gold thin film, Glucose.*
PACS No. 42

مقدمه

پدیده تشدید پلاسمون سطحی (SPR)، پدیده تحریک نوسان‌های جمعی الکترون‌ها با میدان الکترومغناطیسی در سطح مشترک یک فلز و محیط دی‌الکتریک است. در نتیجه، یک موج سطحی به نام موج پلاسمون سطحی تولید می‌شود که در امتداد سطح مشترک حرکت می‌کند و میدان آن به صورت نمایی با فاصله گرفتن از فصل مشترک دو محیط بصورت عمودی اتلاف می‌شود.

برای برانگیختگی پلاسمون‌های سطحی (SP)، بردار موج نور فرودی باید با امواج SP مطابقت داشته باشد که به عنوان شرایط تشدید شناخته می‌شود. در این صورت حداکثر انتقال انرژی نور به موج پلاسمون سطحی (جفت شدگی بین نور و موج پلاسمون سطحی) انجام می‌شود که نتیجه آن حداقل بازتاب نور از منشور است. این شرایط در یک زاویه تابش خاص به نام زاویه تشدید برآورده می‌شود [۱]. شرایط تشدید به عوامل مختلفی از جمله به ثابت دی‌الکتریک محیط سنجش بستگی دارد [۲].

در عمل، پیکربندی کرچمن برای تحریک پلاسمون‌های سطحی استفاده می‌شود. در این پیکربندی، یک منشور با یک لایه نازک از فلز پوشیده شده است که توسط محیط دی‌الکتریک یا همان حسگر احاطه شده است و در سطح مشترک آن پلاسمون‌های سطحی باید برانگیخته شوند. نور با قطبش p از یک وجه منشور به سطح مشترک برخورد می‌کند و پلاسمون‌های سطحی را بر روی سطح مشترک تحریک می‌کند و نور بازتاب شده از منشور اندازه‌گیری می‌شود [۱و۳]. به طور کلی، دو رویکرد برای تحریک پلاسمون‌های سطحی استفاده شده است. در یک رویکرد، طول‌موج نور ثابت نگه داشته شده و زاویه تابش نور تغییر می‌کند (بررسی زاویه‌ای) در حالی که

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

در رویکرد دوم، طول‌موج نور متغیر است و زاویه تابش ثابت نگه داشته می‌شود (بررسی طول‌موجی) [٤].

در این مقاله ابتدا بازتاب از سطح لام نازک، لام ضخیم و منشور با جزییات بررسی شد. سپس با قرار دادن یک لایه نازک طلا بر روی منشور بازتاب از سطح منشور- طلا- هوا اندازه‌گیری شد و در انتها با قرار دادن یک لایه گلوکز بعد از طلا عملکرد حسگری این ساختار بررسی شد.

اندازه‌گیری‌ها و بحث

الف) اندازه‌گیری بازتاب از سطح لام شیشه‌ای

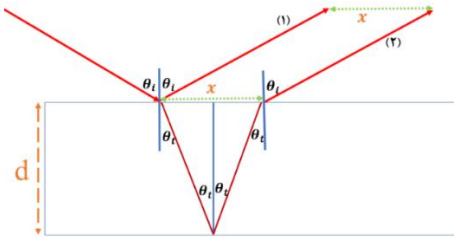
برای اندازه‌گیری نور بازتابی از یک چیدمان اپتیکی شامل لیزر هلیوم نئون، پلاریزور، منشور و صفحه مدرج چرخان، آشکارساز و اسیلوسکوپ استفاده شد. اندازه‌گیری بازتاب از سطح شیشه می‌تواند از روی یک لام شیشه‌ای و یا با استفاده از منشور نیم‌گرد انجام شود. زمانی که نور لیزر به یک شیشه برخورد می‌کند، دو پرتو بازتابی خواهیم داشت. در لام با ضخامت ۱ میلیمتر، بدلیل ضخامت کم لام، این دو لکه نورانی نزدیک هم هستند و تقریبا روی هم می‌افتند و تفکیک دو لکه نور در آشکارساز کار دشواری است (شکل ۱الف). اما زمانی‌که نور لیزر به یک شیشه با ضخامت ٦ میلیمتر برخورد می‌کند، دو پرتو بازتابی خواهیم داشت، که دو لکه نورانی به وضوح از یکدیگر قابل تفکیک هستند (شکل ۱ ب). در بازتاب از سطح منشور نیم‌دایره‌ای، بدلیل اینکه پرتو فرودی همواره عمود بر سطح منشور است، یک لکه خواهیم داشت و بازتاب دقیقا بر روی پرتو فرودی می‌باشد (شکل ۱پ). دلیل پخش‌شدگی نور از سطح منشور به این دلیل است که از یک سطح کوژ بازتاب داریم، ولی در مورد لام، بازتاب از سطح تخت اتفاق می‌افتد.



شکل ۱: تصویر نور بازتابی از لام شیشه‌ای با ضخامت (الف) ۱ میلیمتر، (ب) ٦ میلیمتر (پ) منشور نیم دایره‌ای.

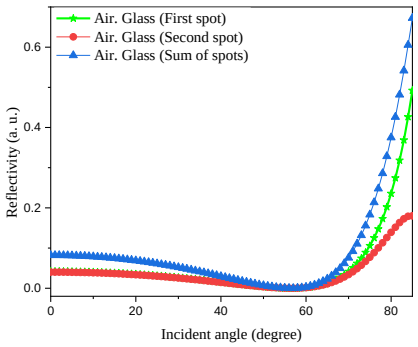
به منظور بررسی فاصله بین پرتوهای بازتابی، شکل ۲ ترسیم شد. همانطور که در شکل ۲ دیده می‌شود، زمانی که نور از سطح هوا (n=۱) به شیشه (n=۱/۵۱۵) وارد می‌شود، پرتو اول بعد از برخورد از سطح شیشه، بازتاب شده و پرتو دوم بعد از ورود به محیط دوم به خط عمود نزدیک شده، سپس از مرز شیشه-هوا بازتاب می‌کند و در انتها بعد از خروج از شیشه مجددا از خط عمود دور و بازتاب می‌شود. طبق محاسبات فاصله بین این دو لکه نورانی طبق فرمول ۱ بدست می‌آید که در آن d ضخامت شیشه و θ_t زاویه بین پرتو ورودی شیشه و خط عمود است.

$$x = 2d\ (tan\ \theta_t) \qquad (۱)$$



شکل۲: نمایش پرتو نور فرودی و بازتابی از سطح لام شیشه‌ای.

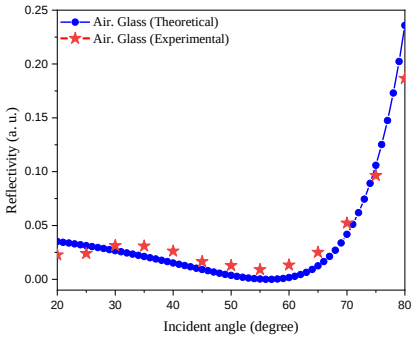
بنابراین در اندازه‌گیری بازتاب از لام نازک مجموع این دو پرتو نور محاسبه می‌شود بطوری‌که لکه نورانی اول، بازتاب مستقیم از سطح هوا- شیشه است، ولی لکه دوم حاصل نورعبوری از هوا به شیشه، بازتاب نور از مرز شیشه-هوا و عبور نور از شیشه به هوا است. محاسبات مربوط به این دو پرتو بازتابی در قطبش P در مراجع وجود دارد [۲] و نمودار مربوط به آن با استفاده از نرم‌افزار متلب شبیه‌سازی است. در شکل ۳، نمودار آبی رنگ مربوط به پرتو بازتابی اول و نمودار قرمز رنگ مربوط به پرتو بازتابی دوم و نمودار سبز رنگ مجموع پرتو اول و دوم است که در محاسبات باید آنرا در نظر گرفت.



شکل ۳: نمودار شبیه‌سازی پرتو بازتابی از لام نازک در قطبش p برای لکه اول، لکه دوم و مجموع انها.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بازتاب نور به صورت تجربی نیز از سطح یک لام نازک با ضخامت ۱ میلیمتر به طور تجربی در زاویه‌های مختلف انجام شد و نتایج در شکل ٤ نشان داده شده است. همانطور که دیده می‌شود کمینه نور بازتابی در زاویه ٥٦/٧ درجه اتفاق می‌افتد و تطابق خوبی با نتایج تئوری دارد.

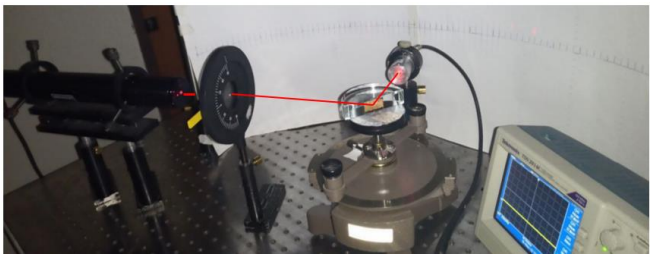


شکل٤: نتایج تجربی و تئوری بازتاب از سطح هوا- شیشه در قطبش p

بررسی تجربی نشان داد اگر چه لکه بازتاب شده از سطح منشور کمی پخش‌شدگی دارد، اما مشکل دو لکه بودن را ندارد و در ادامه، تمام اندازه‌گیری‌ها با استفاده از منشور انجام شد.

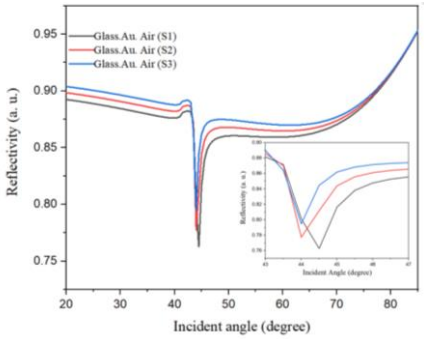
ب) ساختار منشور-طلا

اندازه‌گیری بازتاب از سطح منشور-طلا-هوا با استفاده از چیدمان کرچمن انجام شد (شکل٥).



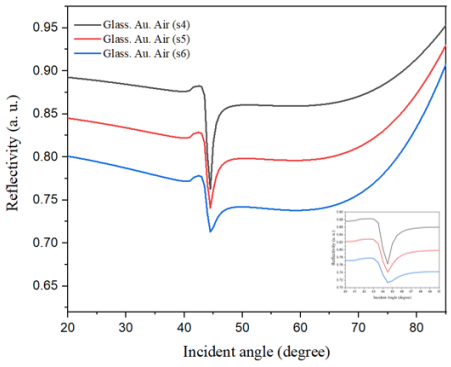
شکل٥: چیدمان آزمایشگاهی اندازه‌گیری نور بازتابی در پیکربندی کرچمن.

در این ساختار پرتو نور فرودی با قطبش p از طریق منشور روی فصل مشترک منشور- لایه نازک طلا فرود می‌آید و تضعیف می‌شود و در ادامه در مرز مشترک فلز- دی‌الکتریک موجب نوسان دسته‌جمعی الکترون‌های آزاد و تشدید پلاسمون سطحی می‌شود. بدلیل اینکه پلاسمون‌های سطحی دارای نوسان طولی هستند، فقط نور با قطبش P که در آن میدان الکتریکی عمود بر مرز مشترک و موازی صفحه فرودی هست، موجب تحریک نوسان‌ها می‌شود و برای قطبش S تحریکی ایجاد نمی‌کند. بازتاب از سطح شیشه-طلا- هوا به صورت تابعی از زاویه تابش فرودی به صورت نظری محاسبه شده است (شکل ٦). ضخامت لایه نازک طلا ١٠٠ نانومتر و ضخامت شیشه و هوا بینهایت در نظر گرفته شده‌اند. در اینجا کمینه بازتاب در حدود زاویه ٤٤ درجه اتفاق می‌افتد. ضریب شکست طلا برابر ٠/١٩٧+ ٣/٠٩i می‌باشد. همچنین با تغییرات جزئی در قسمت موهومی ضریب شکست طلا دیده می‌شود که با زیاد شدن آن، جابه جایی پیک به سمت زوایای کوچکتر را داریم (i ٣/٠٩ +٠/١٩٧=s١، i ٣/١٩ +٠/١٩٧=s٢)، (i ٣/٢٩ +٠/١٩٧=s٣).



شکل ٦: شبیه‌سازی بازتاب پرتو از لایه نازک طلا- هوا در پیکربندی کرچمن با تغییرات جزئی در عدد موهومی ضریب شکست طلا.

همچنین در شکل ٧ دیده می‌شود که با تغییرات جزئی در حد ٠/١ قسمت حقیقی ضریب شکست طلا، عمق دره زیاد می‌شود (i ٣/٠٩ +٠/١٩٧=s١، i ٣/٠٩ +٠/٢٩٧=s٢)، (i ٣/٠٩ +٠/٣٩٧=s٣).

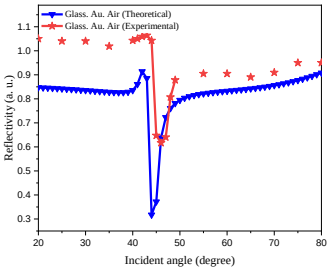


شکل ٧: شبیه‌سازی بازتاب پرتو از لایه نازک طلا- هوا در پیکربندی کرچمن با تغییرات جزئی در عدد حقیقی ضریب شکست طلا.

شدت پرتو بازتابی برای ساختار کرچمن منشور- طلا- هوا به طور تجربی محاسبه و ضخامت لایه نازک طلا ١٠٠ نانومتر محاسبه شده است. بین لایه‌ی طلا چسبیده شده به قاعده منشور از روغن اپتیکی که ضریب شکست آن نزدیک به ضریب شکست منشور است، استفاده شده است. با توجه به شکل ٨ در زاویه ٤٦ درجه کمترین

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

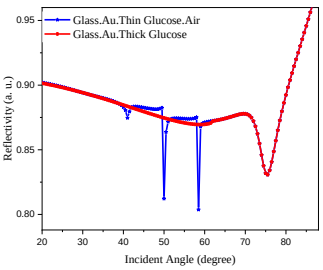
مقدار بازتاب را داریم که نشان‌دهنده بیشترین میزان جفت شدگی و تشدید پلاسمون‌های سطحی با پرتو فرودی است. با توجه به نمودارهای قبلی تفاوت در کمینه بازتاب تئوری و تجربی، احتمالا به خاطر تغییر کمی در قسمت موهومی ضریب شکست می‌باشد.



شکل۸: اندازه‌گیری تجربی و تئوری مقدار بازتاب از ساختار منشور–طلا

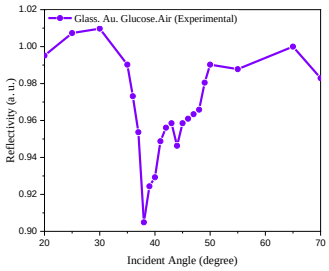
ج) ساختار منشور–طلا–گلوکز

در ابتدا ضریب شکست گلوکز با استفاده از دستگاه رفراکتومتر ۱/۳۳۶۹ اندازه‌گیری شد. برای این ساختار دو حالت پیش‌بینی می‌شود. حالت اول اینکه نور بعد از عبور از منشور و طلا به یک قطره گلوکز نازک برسد و بعد از گلوکز، محیط هوا در نظر گرفته شود. حالت دوم اینکه قطره گلوکز انقدر بزرگ و ضخیم باشد که لایه گلوکز یک لایه کامل محسوب شود و بتوان از هوای بعد از آن در محاسبات چشم‌پوشی شود. نتایج هر دو حالت شبیه‌سازی شده در شکل ۹ نشان داده شده است. همانطور که دیده می‌شود زمانیکه گلوکز به شکل یک لایه کامل باشد، یک دره پهن مشاهده شده و زمانیکه گلوکز به صورت یک لایه نازک باشد و بعد از آن هوا در نظر گرفته شود، سه دره تیز مشاهده می‌شود که بخاطر تداخل سازنده و ویرانگر درون لایه گلوکز است که مابین لایه طلا و هوا رخ می‌دهند.



شکل ۹: محاسبه تئوری برای ساختار منشور–لایه طلا –گلوکز، لایه گلوکز ضخیم (مربع قرمز) و لایه نازک (مربع آبی).

در حالت تجربی نیز، در ساختار کرچمن، بعد از منشور و لایه نازک طلا، یک قطره گلوکز با غلظت ۰/۰۱ مولار بر روی طلا ریخته و بازتاب در زوایای مختلف نور فرودی اندازه‌گیری شد که نتایج آن در شکل ۱۰ قابل مشاهده است.در این شکل تک پیک بازتاب در زاویه ۳۸ درجه اندازه‌گیری شده است و مانند نتیجه تئوری مربوط به لایه گلوکز با ضخامت زیاد می‌باشد. باید توجه داشت که پیک کوچک در زاویه ٤٤ درجه خطای اندازه‌گیری است. برای شناسایی غلظت‌های متفاوت گلوکز، با تغییر غلظت گلوکز استفاده شده روی ساختار، پیک بازتاب حول زاویه کمینه ۳۸ جابه‌جا خواهد شد.



شکل ۱۰: اندازه‌گیری تجربی مقدار بازتاب از ساختار منشور–طلا–لایه گلوکز

نتیجه‌گیری

در این مقاله ابتدا بازتاب از سطح صاف لام به صورت تئوری و تجربی اندازه‌گیری شد و نتایج با هم همخوانی دارد. سپس برای مشاهده اثر تشدید پلاسمون سطحی در مرز مشترک طلا–دی‌الکتریک (هوا) از چیدمان کرچمن استفاده شد و نتایج تئوری و تجربی برای ساختار منشور– طلا– هوا با هم مقایسه شد. در نهایت مولکول زیستی گلوکز روی لایه نازک طلا قرارداده و بازتاب در زوایای مختلف اندازه‌گیری شد.

مرجع‌ها

[1] S. K. Srivastava and I. Abdulhalim; *J. Biosens. Bioelectron* **6**, (2015) 10-12.
[2] P. Jahanshahi and M. Ghomeishi; "Study on dielectric function models for surface plasmon resonance structure"; *The Scientific World Journal*, (2014).
[3] N. F. Murat and W. M. Mukhtar; "Optimization of gold thin films thicknesses in enhancing SPR response"; *IEEE International Conference on Semiconductor Electronics (ICSE)* (2016) 244-247.
[4] M. Wang and Y. Huo; "Theoretical design of a surface plasmon resonance sensor with high sensitivity and high resolution based on graphene–WS 2 hybrid nanostructures and Au–Ag bimetallic film"; *RSC advances* **7**, No. 75 (2017) 47177-47182.
[5] S. Umegaki and H. Inoue; "Optical bistability using a magneto- optic modulator"; *Applied Physics Letters*, No. 38(10) (1981), 752-754.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

عدسی بلور فوتونی ضریب شکست تدریجی تنظیم پذیر از طریق شبه فلز دیراک

پناهیان فر، پویا[1]؛ رضائی، بهروز[1]

[1]دانشکده فیزیک، دانشگاه تبریز، تبریز

چکیده

در این مقاله، یک بلور فوتونی ضریب شکست تدریجی دو بعدی متشکل از میله های دی الکتریک شبه فلز دیراک در زمینه هوا از طریق کاهش اندازه ابعاد سلول اولیه در جهت عمود بر انتشار نور طراحی می کنیم. محاسبه منحنی پاشندگی بلور فوتونی و شبیه سازی انتشار نور در بلور فوتونی ضریب شکست تدریجی پیشنهاد شده با استفاده از روش عددی تفاضل متناهی در حوزه زمان (FDTD) انجام یافت. نتایج عددی نشان می دهد که ساختار پیشنهاد شده دارای قابلیت کانونی است و فاصله کانونی آن می تواند با تغییر انرژی فرمی شبه فلز دیراک تنظیم پذیر شود. کنترل دینامیکی فاصله کانونی بلور فوتونی ضریب شکست تدریجی می تواند به عنوان عدسی الکترو-اپتیک قابل تنظیم مورد استفاده قرار گیرد.

واژه های کلیدی: بلور فوتونی ضریب شکست تدریجی، شبه فلز دیراک، ضریب شکست موثر، فاصله کانونی.

Tunable graded index photonic crystal lens via Dirac semimetal

Panahianfar, Pouya[1]; Rezaei, Behrooz[1]

[1] *Department of Physics, University of Tabriz, Tabriz*

Abstract

In this paper, we design a two-dimensional (2D) graded-index photonic crystal (GRIN PC) made of Dirac semimetal dielectric rods in air background by reducing the size of unit cell dimensions in a direction perpendicular to the light propagation. The calculation of dispersion relation of photonic crystal and the simulation of light propagation in the proposed GRIN PC were performed using 2D finite-difference time-domain (FDTD) method. The numerical results show that the proposed structure has focusing ability for incident TM-polarized (electric field is along the rod axis) optical beam and the focal distance (FD) can be tuned by changing the Fermi energy of Dirac semimetal. The dynamic control of the FD of GRIN PC can be utilized as a tunable electro-optic lens.

***Keywords**: Graded index photonic crystal, Dirac semimetal, Effective refractive index, Focal distance*

PACS No. 78

مقدمه

بلورهای فوتونی آرایه‌ای متناوب از مواد دی‌الکتریک با ضریب شکست های متفاوت هستند که به طور منظم در یک، دو یا سه بعد در کنار یکدیگر قرار گرفته‌اند [1]. ویژگی اصلی این ساختارها گاف نواری فوتونی (ناحیه ممنوعه فرکانسی) آنهاست که ناشی از مدولاسیون نور توسط توزیع فضایی ثابت‌های دی‌الکتریک متناوب است [2]. بررسی و مهندسی گاف نواری فوتونی منجر به کنترل و هدایت امواج الکترومغناطیس در این ساختارها می‌شود. در صورت اعمال برخی تغییرات ساختاری در بلورهای فوتونی، می‌توان به زیرشاخه‌ی جدیدی از این دسته از بلورها، که بلورهای فوتونی با ضریب شکست تدریجی نامیده می‌شوند، دست یافت. از جمله تغییرات ساختاری می‌توان به مواردی مانند: تغییر در ضریب

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

شکست ماده [3]، تغییر در ثابت شبکه [4]، تغییر در حجم سلول واحد بلور اشاره کرد [5]. روش‌های مذکور باعث ایجاد گرادیان ضریب شکست در جهت معین شده و منجر به کانونی کردن موج ورودی می‌شود که در جهت عمود بر راستای گرادیان ضریب شکست انتشار می یابد. با در نظر گرفتن طول معین برای ساختار بلور فوتونی ضریب شکست تدریجی در راستای انتشار و ایجاد یک گرادیان ضریب شکست با توزیع فضایی مشخص در جهت عمود بر انتشار نور، این ساختار می تواند همانند یک عدسی نوری مسطح عمل کرده و نور فرودی را در نقطه ای بنام نقطه کانونی همگرا نماید. مهمترین نکته در طراحی بلورهای فوتونی ضریب شکست تدریجی، تعیین ضریب شکست موثر (ضریب شکست گروه) سلول واحد این ساختارها می‌باشد. برای این منظور منحنی پاشندگی ساختار را در فرکانسهای پایین (طول موجهای بلند) در نظر گرفته و با محاسبه شیب آن ضریب شکست گروه یا ضریب شکست موثر ($n_g = c(\partial\omega/\partial k)^{-1}$) را بدست می‌آوریم [6]. در ادامه‌ی تحقیقات بر روی این ساختارها، در چند سال اخیر توجه زیادی برای تنظیم پذیری خواص نوری این ساختارها به منظور ساخت ادوات اپتیکی پویا جلب شده است. بکارگیری مواد تنظیم پذیر در بلورهای فوتونی ضریب شکست تدریجی منجر به قابلیت کنترل فاصله کانونی و شدت نور متمرکز شده می‌شود. برای این منظور، محققین از الاستومرهای دی الکتریک [7]، بلورهای پلاسمونی [8] و بلور مایع [3] استفاده کرده اند. اخیراً ماده‌ی کوانتومی جدیدی بنام شبه فلز دیراک به دلیل سهولت در تولید، پایداری و تحرک پذیری بالا توجه محققان را به خود جلب کرده است [9]. تابع دی الکتریک این مواد با تغییر انرژی فرمی آن از طریق اعمال ولتاژ گیت می تواند کنترل شود، بطوریکه در فرکانس‌های پایینتر و بالاتر از انرژی فرمی، به ترتیب پاسخ فلزی و دی‌الکتریکی نشان می‌دهد [9، 10]. در این مقاله بلور فوتونی ضریب شکست تدریجی متشکل از میله های شبه فلز دیراک در زمینه هوا را با آرایش مربعی طراحی نموده و خاصیت کانونی آن را برای طراحی عدسی مورد مطالعه قرار می‌دهیم. همچنین با تغییر انرژی فرمی شبه فلز دیراک، کنترل پذیری فاصله کانونی عدسی تشکیل شده را بررسی می کنیم.

روش محاسبات

تابع دی‌الکتریک شبه فلز دیراک از رابطه‌ی زیر محاسبه می-شود [9]:

$$\varepsilon = \varepsilon_b + \frac{i\sigma_{DS}}{\varepsilon_0 \omega} \quad (1)$$

که ε_b ثابت دی الکتریک موثر زمینه و ε_0 ثابت گذردهی خلا است. σ_{DS} رسانندگی نوری شبه فلز دیراک بوده و دارای قسمت‌های حقیقی و موهومی است که در دماهای پایین که $K_B T \ll E_F$ عبارتند از:

$$\mathrm{Re}\,\sigma(\Omega) = \frac{e^2}{\hbar}\frac{g k_F}{24\pi}\Omega\theta(\Omega-2) \quad (2)$$

$$\mathrm{Im}\,\sigma(\Omega) = \frac{e^2}{\hbar}\frac{g k_F}{24\pi^2}\left[\frac{4}{\Omega} - \Omega\ln\left(\frac{4\varepsilon_c^2}{|\Omega^2-4|}\right)\right] \quad (3)$$

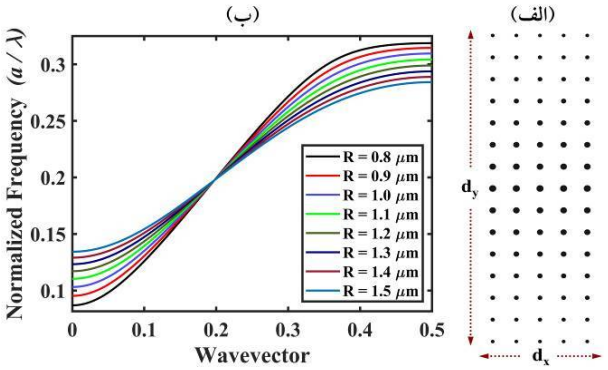
در روابط فوق e بار الکترون، g ضریب تبهگنی، $\hbar$ ثابت کاهش یافته‌ی پلانک، E_F انرژی فرمی، v_F سرعت فرمی، E_c انرژی قطع، $\Omega = \hbar\omega / E_F$، $\varepsilon_c = E_c / E_F$ و $k_F = E_F / \hbar v_F$ تکانه فرمی می‌باشد. برای محاسبه ساختار باند بلور فوتونی دو بعدی مورد نظر، همچنین شبیه سازی انتشار امواج الکترومغناطیس در بلور فوتونی ضریب شکست تدریجی طراحی شده از هر دو نرم افزار RSoft و Lumerical بر پایه روش تفاضل متناهی در حوزه زمان (FDTD) استفاده شده است [11].

نتایج و بحث

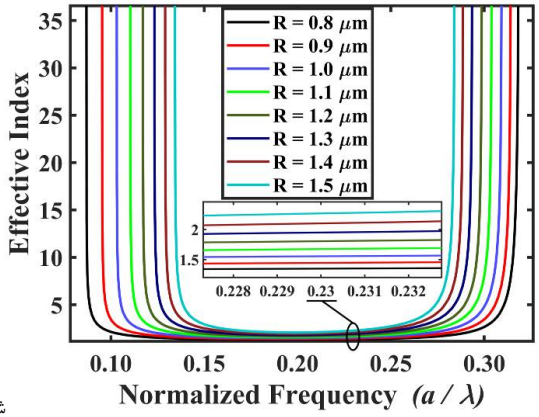
در این مقاله، شبه فلز دیراک مورد نظر از جنس شبه بلور AlCuFe با مشخصات $g = 40$ و $\varepsilon_b = 1$ بوده و ساختار مورد مطالعه بصورت شبکه مربعی از میله های شبه فلز دیراک در زمینه هوا در نظر گرفته شده است. شکل 1-الف ساختار بلور فوتونی ضریب شکست تدریجی طراحی شده را نشان می دهد که از تغییر در حجم سلول واحد در راستای عمود بر انتشار حاصل شده و دارای پهنای $d_y = 15a$ و طول $d_x = 5a$ می باشد، بطوریکه $a = 10\,\mu m$ ثابت شبکه است. به منظور طراحی ساختار مورد نظر و بررسی خاصیت کانونی آن، تغییرات نمودار پاشندگی نوار اول ساختار را برای قطبش TM به ازای مقادیر مختلف شعاع میله های شبه فلز دیراک به ازای انرژی فرمی $E_F = 20\,meV$ مورد

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مطالعه قرار داده‌ایم. شکل 1-ب این تغییرات را برای شعاع‌های $R=0.8-1.5\mu m$ با گام $0.1\mu m$ نشان می دهد. ملاحظه می‌شود که تغییرات شعاع میله ها تاثیر قابل ملاحظه ای روی منحنی پاشندگی دارد. در گام بعدی، با محاسبه شیب این منحنی های پاشندگی، ضریب شکست گروه یا ضریب شکست موثر را طبق فرمول $n_g=c(\partial\omega/\partial k)^{-1}$ بر حسب فرکانس بهنجارش a/λ بدست می‌آوریم. نتایج حاصل در شکل 2 نمایش داده شده است.

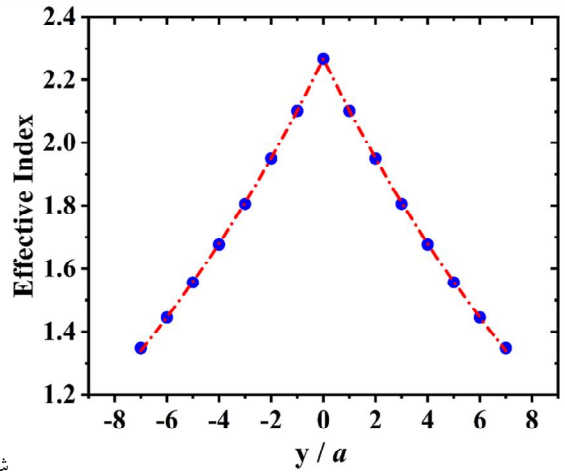


شکل 1: (الف) نمایش طرحوار بلور فوتونی ضریب شکست تدریجی با شبکه مربعی متشکل از میله های شبه فلز دیراک در زمینه هوا، (ب) تغییرات منحنی پاشندگی نوار اول برای قطبش TM بر حسب مقادیر مختلف شعاع میله ها به ازای انرژی فرمی $E_F=20meV$



شکل 2: تغییرات ضریب شکست موثر بر حسب فرکانس بهنجارش به ازای انرژی فرمی $E_F=20meV$ و مقادیر مختلف شعاع میله ها.

همانطور که از این شکل واضح است، نمودار ضریب شکست برای هر شعاع معین تقریبا دارای شیب ثابت در بازه فرکانسی معین است. همچنین به ازای یک فرکانس معین، مقدار ضریب شکست موثر با افزایش شعاع افزایش می‌یابد. با بزرگنمایی روی فرکانس $a/\lambda=0.23$ و مجاورت آن، طبق پیوست شکل 2، این امر به وضوح نمایان است. بر این اساس می‌توان مقدار ضریب شکست موثر را در راستای عمود بر انتشار نور (راستای y) در هر سلول واحد تعیین نمود. مقادیر گسسته ضریب شکست موثر بر حسب y/a برای $a/\lambda=0.23$ در شکل 3 نشان داده شده است، با این حال، این مقادیر گسسته به تابع $n_{eff}(y)=n_0\exp^{-\beta|y|}$ برازش می‌شوند که در آن β ضریب گرادیان و n_0 ضریب شکست موثر در مرکز ($y=0$) بوده و به ترتیب دارای مقادیر $\beta=0.075$ و $n_0=2.267$ می باشند. مقادیر موثر ضریب شکست در $y=\pm7a$، طبق شکل 3 برابر $n(y=\pm7a)=1.35$ است.

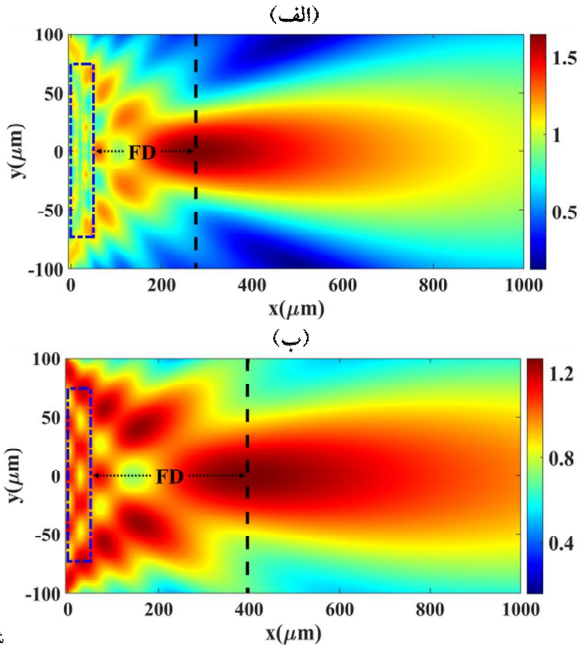


شکل 3: پروفایل ضریب شکست موثر با تابع نمایی برازش شده

با توجه به گرادیان ضریب شکست ایجاد شده در راستای عمودی، این ساختار می تواند نقش یک عدسی را ایفا نماید و باعث کانونی کردن نور فرودی بر روی محور مرکزی گردد. برای نشان دادن این موضوع، با استفاده از روش FDTD شبیه سازی انتشار نور فرودی با قطبش TM را مورد مطالعه قرار می‌دهیم. برای نور فرودی با فرکانس $a/\lambda=0.23$، نتایج شبیه سازی در شکل 4-الف نشان داده شده است. نتایج محاسبات نشان می‌دهد که فاصله کانونی عدسی طراحی شده (فاصله نقطه کانونی با شدت بیشینه از لبه جلویی ساختار عدسی) برابر $FD=22.5a$ است. با توجه به اینکه تابع دی الکتریک شبه فلز دیراک با تغییر انرژی فرمی از طریق اعمال ولتاژ گیت می‌تواند تغییر نماید، بنابراین انتظار می‌رود

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

که با تغییر انرژی فرمی، می توان فاصله کانونی عدسی طراحی شده را بطور دینامیکی کنترل نمود. برای بررسی این موضوع، شبیه سازی انتشار نور فرودی با فرکانس $a/\lambda = 0.23$ را به ازای انرزی فرمی $E_F = 24meV$ انجام می‌دهیم. نتایج این شبیه سازی در شکل 4-ب نمایش داده شده است، بطوریکه محاسبات انجام یافته نشان می دهد که فاصله کانونی ساختار در این حالت برابر $FD = 34.5a$ است. بنابراین ملاحظه می‌شود که فاصله کانونی عدسی با تغییر انرژی فرمی قابل کنترل است. کنترل دینامیکی انتشار نور بوسیله بلور فوتونی ضریب شکست تدریجی مبتنی بر شبه فلز دیراک می‌تواند به عنوان یک عدسی الکترو-اپتیکی قابل تنظیم مورد استفاده قرار گیرد.



شکل 4: توزیع فضایی شدت میدان الکتریکی ساختار ضریب شکست طراحی شده با طول $d_x = 5a$ و پهنای $d_y = 15a$ برای نور فرودی با قطبش TM و فرکانس $a/\lambda = 0.23$ به ازای انرژی فرمی (الف) $E_F = 20meV$ و (ب) $E_F = 24meV$.

بررسی ها نشان می دهد که نتیجه ی فوق برای برخی فرکانس های فرودی در بازه ی $a/\lambda = 0.23 - 0.29$ نیز برقرار است و نتایج محاسبات مربوط در جدول-1 گزارش شده است. مطابق جدول-1 معلوم می شود که فاصله کانونی با تغییر انرژی فرمی تغییر می کند و در مقایسه با نتایج گزارش شده در [3] و [7] به ترتیب با میزان تنظیم پذیری $1.7a$ و $12.5a$ کنترل دینامیکی قابل ملاحظه ای را نشان می دهد.

جدول-1: تنظیم پذیری فاصله کانونی عدسی طراحی شده برای فرکانس های فرودی مختلف در بازه های مختلف انرژی فرمی

E_{F1}	E_{F2}	a/λ	مقدار تنظیم پذیری
$20meV$	$24meV$	0/23	$12a$
$22meV$	$26meV$	0/25	$13a$
$24meV$	$28meV$	0/27	$13/5a$
$26meV$	$30meV$	0/29	$15/5a$

نتیجه گیری

در این مقاله ساختار بلور فوتونی ضریب شکست تدریجی متشکل از شبه فلز دیراک در زمینه هوا را طراحی کرده و با تغییر انرژی فرمی ماده مذکور، خاصیت تنظیم پذیری فاصله کانونی را شبیه سازی کردیم. بررسی‌های انجام شده نشان می دهد که فاصله کانونی عدسی تشکیل شده برای فرکانسهای فرودی در محدوده $a/\lambda = 0.23 - 0.29$، با تغییر انرژی فرمی شبه فلز دیراک دارای تنظیم پذیری قابل ملاحظه ای است و می‌تواند به عنوان یک عدسی الکترو-اپتیکی قابل تنظیم مورد استفاده قرار گیرد.

مرجع ها

[۱] J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, J. N. Winn, and R. D. Meade; *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light (Second Edition)* (Princeton University Press, 2011).
[۲] Q. Gong and X. Hu; *Photonic Crystals: Principles and Applications* (Pan Stanford Publishing Pte. Ltd., 2013).
[۳] B. Rezaei, I. H. Giden, and H. Kurt; "Tuning light focusing with liquid crystal infiltrated graded index photonic crystals"; *Opt. Commun.* **382**, (2017) 28–35 .
[۴] H. Kurt, E. Colak, O. Cakmak, H. Caglayan, and E. Ozbay; "The focusing effect of graded index photonic crystals"; *Appl. Phys. Lett.* **93**, (2008) 3–5.
[۵] Q. Wu, J. M. Gibbons, and W. Park; "Graded negative index lens by photonic crystals"; *Opt. Express* **16**, (2008) 16941-16949.
[۶] H. Kurt and D. S. Citrin; "Graded index photonic crystals"; *Opt. Express* **15**, (2007) 1240-1253.
[۷] H. Wen, I.-L. Chang, and L.-W. Chen, "Beam manuplating by graded photonic crystal slab made of dielectric elastomer actuators"; *Opt. Commun.* **285**, (2012) 5524-5530.
[۸] B. Vasić, and R.Gajić; "Tunable gradient refractive index optics using graded plasmonic crystals with semiconductorrods"; J. Opt. Soc. Am. B **29**, (2012) 79-87.
[۹] O. V. Kotov and Y. E. Lozovik; "Dielectric response and novel electromagnetic modes in three-dimensional Dirac semimetal films"; *Phys. Rev. B* **93**, (2016) 235417.
[۱۰] Q. Wang *et al.*; "Tunable defect modes of one-dimensional photonic crystals containing a Dirac semimetal-based metamaterial defect layer"; *Appl. Opt.* **58**, (2019) 94-101.
[۱۱] F. Oskooi, D. Roundy, M. Ibanescu, P. Bermel, J. D. Joannopoulos, and S. G. Johnson; "Mepp: a flexible free-software package for electromagnetic simulations by the FDTD method"; *Comput. Phys. Commun.* **181**, (2010) 687-702.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

طراحی فیلترچند کاناله بلور فوتونی فیبوناچی یک بعدی مرتبه سوم شامل شبه فلز دیراک

رضائی ، بهروز[۱] ؛ سپه وندی، وحید[۱]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه تبریز ، بلوار ۲۹بهمن ،تبریز

چکیده

در این مقاله یک فیلتر نوری چندکاناله بر مبنای بلور فوتونی یک بعدی با ساختار فیبوناچی مرتبه سوم شامل شبه فلز دیراک پیشنهاد شده است. تنظیم پذیری خواص نوری ساختار پیشنهاد شده بصورت تابعی از انرژی فرمی شبه فلز دیراک و زاویه فرودی موج الکترومغناطیس مورد مطالعه قرار گرفته است. همچنین اثر تعداد دوره تناوب ساختار فیبوناچی بر روی کانالهای نوری مورد بررسی قرار گرفت. نتایج محاسبات نشان می دهد که فرکانس و میزان عبور فیلتر چند کاناله بر حسب انرژی فرمی و زاویه تابش تغییرات قابل ملاحظه ای دارد. بعلاوه، تعداد کانالهای نوری با افزایش تعداد دوره تناوب ساختار فیبوناچی افزایش می یابد. فیلترهای نوری چندکاناله تنظیم پذیر می توانند در شبکه های تمام-نوری مورد بهره برداری قرار گیرند.

واژه های کلیدی: *بلورهای فوتونی- فیلتر نوری چند کاناله- شبه فلز دیراک-انرژی فرمی- ساختار فیبوناچی*

Design of multichannel one-dimensional third-order Fibonacci photonic crystal filter containing Dirac semimetal

Rezaei, Behrooz[۱]; Sepahvandi, Vahid[۱]

[۱] *Department of Physics, University of Tabriz, Tabriz*

Abstract

In this paper, a multichannel optical filter based on one-dimensional photonic crystal with a third-order Fibonacci structure including Dirac semimetal (DS) has been proposed. The tuning of the optical properties of the proposed structure has been studied as a function of DS Fermi energy and the incident angle of the electromagnetic wave. Also, the effect of periodic number of Fibonacci structure on optical channels was investigated. The results reveal that changes in Fermi energy and incident angle have a remarkable effect on the frequency and transmission amount of the multi-channel filter. In addition, the number of optical channels rises by increasing the periodic number of Fibonacci structure. The multichannel optical filters can be utilized in all-optical networks.

***Keywords**: Photonic crystals, Multichannel optical filter, Dirac semimetal, Fermi energy, Fibonacci structure*

PACS No. ۷۸

مقدمه

با توجه به نیازهای ارتباطی امروز، سرعت انتقال اطلاعات و تبادل داده ها یکی از پارامترهای مهم شبکه های مخابراتی است. در حال حاضر استفاده از نور به عنوان حامل سیگنالها که در مقایسه با الکتریسیته سرعت بیشتری دارد، حجم ارسال اطلاعات را در شبکه های مخابراتی نوری به طور چشمگیری افزایش داده است. با بکارگیری فناوری های تقسیم طول موج می توان از یک فیبر نوری برای انتقال چندین کانال نوری با طول موجهای متفاوت استفاده کرد [۱، ۲].

فیلترها از قسمتهای اساسی گیرنده ها و فرستنده های مخابراتی هستند که برای حذف مولفه های فرکانسی ناخواسته، پردازش سیگنال و غیره بکار می روند. در مخابرات نوری از فیلترهای نوری برای حذف نوفه و جداسازی کانال های اطلاعاتی با فواصل طول موجی کم استفاده می شود. فیلترهای با ضریب کیفیت زیاد

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

برای جلوگیری از پدیده پراش در حین انتقال اطلاعات درون فیبرهای نوری به کار می روند [۳]. بلورهای فوتونی به عنوان یکی از ساختارهای پایه برای طراحی فیلترهای نوری بکار می روند. بلورهای فوتونی، ساختارهای متناوبی از مواد دی الکتریک با ضریب شکست متفاوت هستند که می توانند در یک، دو یا سه بعد تناوبی باشند. تناوب در ضریب شکست بلورهای فوتونی انتشار امواج الکترومغناطیسی را تحت تاثیر قرار می دهد و این ویژگی باعث شکل گیری نوار ممنوعه فوتونی می شود [۱، ٤]. نوار ممنوعه فوتونی محدوده ای از طول موج هاست که در آن هیچ فوتونی نمی تواند در بلور انتشار یابد. این ویژگی طراحی افزاره های نوری متفاوت مانند سوئیچ ها، فیلترها، مالتی پلکسرها و دی مالتی پلکسرها را ممکن می سازد. با طراحی بلورهای فوتونی می توان فیلترهای نوری با حجم کم و دارای قابلیت مجتمع سازی نوری ساخت که در مخابرات نوری بکار گرفته شوند [۲، ۵]. محققین اخیراً حالت نوینی از مواد کوانتومی کشف کرده اند که به عنوان گرافن سه بعدی یا شبه فلز دیراک سه بعدی نام گذاری شده است، که عملکردی شبیه به گرافن دارد ولی در عین حال رسانندگی به مراتب بیش تری نسبت به گرافن دارد. این رسانندگی تابعی از پارامترهای فرکانس، دما و چگالی حاملین می باشد که می توان با تغییر این پارامترها آن را کنترل نمود. این قابلیت روش بسیار قوی را برای تنظیم پذیری خواص نوری بلور های فوتونی فیبوناچی شامل شبه فلز دیراک در بازه فرکانسی تراهرتز فراهم می نماید. در این مقاله با استفاده از سری فیبوناچی مرتبه سوم بلور فوتونی یک بعدی شامل شبه فلز دیراک توانسته ایم فیلتر چندکاناله باریک طراحی کنیم که به وسیله انرژی فرمی شبه فلز دیراک و سایر پارامتر ها قابلیت تنظیم پذیری را دارد که در ادامه به تفصیل در مورد آن بحث می کنیم. برای محاسبات عددی از روش ماتریس انتقال تحت نرم افزار متلب استفاده می کنیم.

روش محاسبات

تابع دی الکتریک شبه فلز دیراک، ε_{DS}، بر اساس تقریب فاز تصادفی از رابطه زیر حاصل می شود [٦]:

$$\varepsilon_{DS}(\omega)=\varepsilon_b+i\frac{\sigma_{DS}}{\omega\varepsilon_0} \qquad (۱)$$

که ε_b ثابت دی الکتریک موثر زمینه و σ_{DS} رسانندگی نوری شبه فلز دیراک است که قسمت های حقیقی و موهومی آن عبارتند از:

$$\mathrm{Re}\,\sigma_{DS}(\Omega)=\frac{e^2}{\hbar}\frac{gk_F}{24\pi}\Omega G(\Omega/2) \qquad (۲)$$

$$\mathrm{Im}\,\sigma_{DS}(\Omega)=\frac{e^2}{\hbar}\frac{gk_F}{24\pi^2}[\frac{4}{\pi}(1+\frac{\pi^2}{3}(\frac{K_BT}{E_F})^2) +8\Omega\int_0^{\varepsilon_c}(\frac{G(\varepsilon)-G(\Omega/2)}{\Omega^2-4\varepsilon^2})\varepsilon d\varepsilon] \qquad (۳)$$

در روابط فوق e بار الکترون، g ضریب تبهگنی، $\hbar$ ثابت کاهش یافته‌ی پلانک، K_B ثابت بولتزمن، $G(E)=n(-E)-n(E)$ ، $n(E)$ تابع توزیع فرمی، E_F انرژی فرمی، v_F سرعت فرمی، E_c انرژی قطع، $\Omega=\hbar\omega/E_F$ فرکانس نرمالیزه، $\varepsilon_c=E_c/E_F$ و $k_F=E_F/\hbar v_F$ تکانه فرمی و T دما می باشد. برای محاسبه طیف عبوری ساختار مورد نظر و طراحی فیلتر از روش ماتریس انتقال مبتنی بر ماتریس انتشار و ماتریس دینامیکی استفاده می کنیم. بر این اساس، ماتریس انتقال کل ساختار بصورت زیر بیان می شود [۷]:

$$T_{tot}=P_jD_{j,j+1}\ldots P_{N-1}D_{N-1,N}D_{N,sub}=\begin{pmatrix}m_{11}&m_{12}\\m_{21}&m_{22}\end{pmatrix} \qquad (٤)$$

که در آن P_j ماتریس انتشار در لایه j ام با ضخامت d و $D_{j,j+1}$ ماتریس دینامیکی در مرز بین دو لایه می باشد و به ترتیب عبارتند از:

$$P_j(d)=\begin{pmatrix}e^{-ik_{z,j}d}&0\\0&e^{ik_{z,j}d}\end{pmatrix} \qquad (۵)$$

$$D_{j,j+1}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1+k_{z,j+1}/k_{z,j}&1-k_{z,j+1}/k_{z,j}\\1-k_{z,j+1}/k_{z,j}&1+k_{z,j+1}/k_{z,j}\end{pmatrix} \qquad (٦)$$

مولفه z بردار موج برای قطبش TE بصورت $k_{z,j}=k_{z,j}$ و برای قطبش TM بصورت $k_{z,j}=k_{z,j}/\varepsilon_j$ می باشد و داریم:

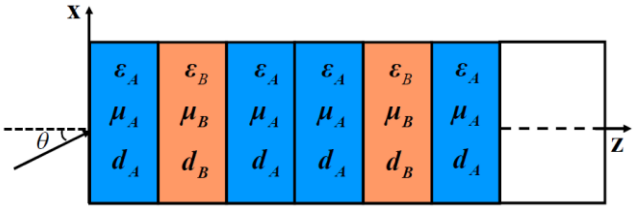
$$k_{z,j}=\sqrt{(\omega/c)^2\varepsilon_j-k_x^2} \qquad (۷)$$

نتایج و بحث

فیلتر نوری پیشنهادی بر مبنای بلور فوتونی یک بعدی شبه تناوبی فیبوناچی مرتبه سوم شامل شبه فلز دیراک می باشد که ماده A شبه فلز دیراک دارای مشخصات $g=٤$ ، تراوایی

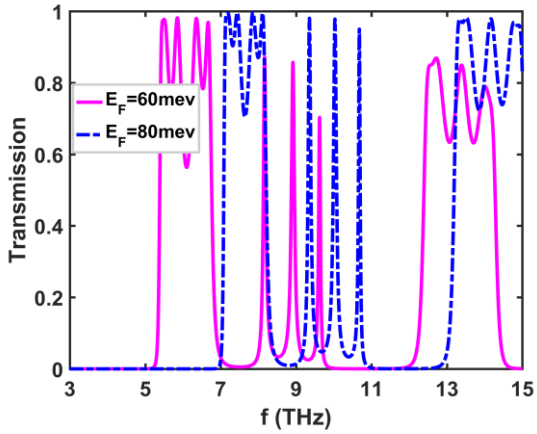
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مغناطیسی $\mu=3$ ، $\varepsilon_b=13$ و ضخامت $d_A=2\mu m$ و ماده B از جنس دی الکتریک SiO_2 با مشخصات $\varepsilon_B=2/25$ ، $\mu_B=1$ و ضخامت $d_B=2\mu m$ در نظر گرفته شده است [۸]. سلول اولیه ساختار مورد مطالعه در شکل ۱ نشان داده شده است و از سری مرتبه سوم فیبوناچی به صورت $F=[ABA]$ پیروی می کند.



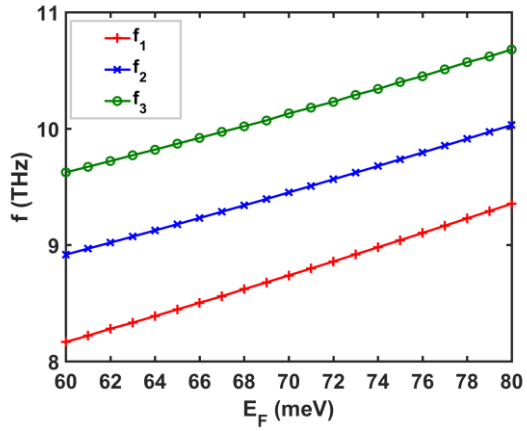
شکل ۱: بلور فوتونی یک بعدی فیبوناچی مرتبه سوم با چیدمان $[ABA]$

در گام اول تابش عمودی را در نظر می گیریم. طیف عبوری ساختار با در نظر گرفتن پارامترهای ذکر شده در بالا برای قطبش TE (میدان الکتریکی در راستای محور y و میدان مغناطیسی در صفحه xz) به ازای انرژیهای فرمی های ۶۰ و ۸۰ میلی الکترون ولت در دمای $T=100K$ با تعداد دوره $N=4$ (تعداد تکرار سلول واحد) در شکل ۲ نمایش داده شده است.



شکل ۲: طیف عبوری ساختار پیشنهادی با تعداد دوره $N=4$ به ازای انرژیهای فرمی ۶۰ و ۸۰ میلی الکترون ولت.

همانگونه که از شکل ۲ نمایان می باشد، ساختار پیشنهاد شده به ازای هر دو مقدار انرژی فرمی دارای سه کانال نوری است و این ساختار می تواند به عنوان فیلتر چندگانه نوری عمل نماید. همچنین مشخص است که با تغییر انرژی فرمی از ۶۰ به ۸۰ میلی الکترون ولت، موقعیت فرکانسی و میزان عبور هر کدام از کانالهای نوری تغییر می یابند. محاسبات عددی نشان می دهد که فرکانس کانالهای اول تا سوم با افزایش انرژی فرمی جابجا شده و به ترتیب از ۸/۱۶۶ ، ۸/۹۱۷ و ۹/۶۲۴ تراهرتز به ۹/۳۵۵، ۱۰/۰۳ و ۱۰/۶۸ تراهرتز جابجا می شوند. همچنین میزان عبور کانال اول از ۰/۸۷۱۶ به ۰/۹۸۰۳ و کانال دوم از ۰/۸۵۷ به ۰/۹۷۸ و کانال سوم از ۰/۷۰۳۲ به ۰/۹۴۹۹ افزایش می یابند. این نتایج نشان دهنده تنظیم پذیری فیلتر طراحی شده به وسیله تغییر انرژی فرمی شبه فلز دیراک می باشد. در ادامه برای بررسی بیشتر، نمودار تغییرات فرکانس کانالهای نوری را برحسب انرژی فرمی شبه فلز دیراک، تحت تابش عمودی موج الکترومغناطیس در شکل ۳ نشان داده ایم.

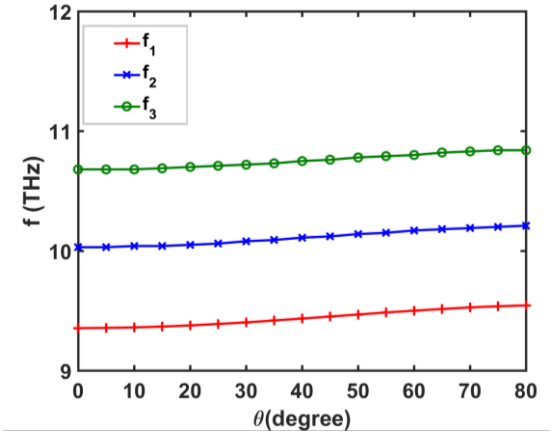


شکل۳: تغییرات فرکانس کانالهای نوری برحسب انرژی فرمی برای قطبش TE.

مشاهده می شود که فرکانس هر سه کانال با افزایش انرژی فرمی شبه فلز دیراک در محدوده ۶۰ تا ۸۰ میلی الکترون ولت افزایش می یابد. با توجه به نتایج ارائه شده در این شکل ملاحظه می شود که فرکانس کانال اول از ۸/۱۶۶ به ۹/۳۵۵ تراهرتز، کانال دوم از ۸/۹۱۷ به ۱۰/۰۳۰ تراهرتز و کانال سوم از ۹/۶۲۴ به ۱۰/۶۸۰ تراهرتز جابجا می شوند و میزان تنظیم پذیری آنها به ترتیب عبارتند از: ۱/۱۸۹ تراهرتز، ۱/۱۱۳ تراهرتز و ۱/۰۵۶ تراهرتز. بدین ترتیب با تغییر دادن انرژی فرمی شبه فلز دیراک در ساختار طراحی شده، می توان فیلتر چندکاناله با خواص نوری تنظیم پذیر بدست آورد. همچنین اثر تغییرات زاویه فرودی موج الکترومغناطیس بر روی فرکانس کانالهای نوری را مورد مطالعه قرار دادیم. شکل ۴ تغییرات فرکانس کانالهای نوری را بر حسب زاویه تابش به ازای انرژی فرمی ۸۰ میلی الکترون ولت برای قطبش TE نشان می دهد.

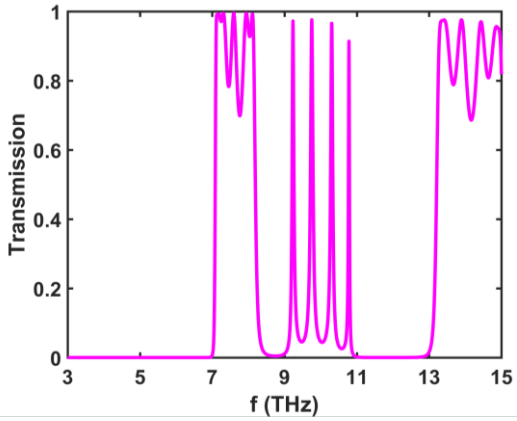
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

ملاحظه می شود که با تغییر زاویه تابش فرکانس کانالهای نوری تغییرات قابل ملاحظه ای را نشان می دهد و با افزایش زاویه تابش به طرف فرکانسهای بالا جابجا می شوند.



شکل٤: تغییرات فرکانس کانالهای نوری برحسب زاویه تابش موج فرودی به ازای انرژی فرمی $E_F = ۸۰meV$.

با توجه به شکل ٤ مشاهده می شود که فرکانس فیلتر اول از ۹/۳۵۵ تا ۹/۵٤٤ تراهرتز، فیلتر دوم از ۱۰/۰۳ تا ۱۰/۲۱ تراهرتز و فیلتر سوم از ۱۰/٦۸ تا ۱۰/۸٤ تراهرتز افزایش می یابند. پس می توان نتیجه گرفت که تغییرات زاویه تابش موج الکترومغناطیس سبب تغییر در موقعیت فرکانسی کانال ها می شود که این خود بیانگر تنظیم پذیری فیلتر طراحی شده با تغییرات زاویه فرودی موج الکترومغناطیس می باشد. در پایان اثر تعداد دوره را بر روی فیلتر طراحی شده مورد مطالعه قرار دادیم. شکل ۵ طیف عبوری ساختار را برای دوره $N=۵$، به ازای انرژی فرمی ۸۰ میلی الکترون ولت نشان می دهد. ملاحظه می شود که تعداد کانالهای فیلتر نوری یک واحد افزایش یافته و یک فیلتر نوری چهار کاناله ایجاد شده است. فرکانس و میزان عبور کانال اول برابر (۹/۲۳٤THz,۰/۹۷۲٤)، کانال دوم (۹/۷۵٤THz,۰/۹۷٦)، کانال سوم (۱۰/۳۱THz,۰/۹٦۵۸) و کانال چهارم (۱۰/۷۸THz,۰/۹۱٤) می باشد. محاسبات نشان می دهد که اولاً با افزایش تعداد دوره ها، تعداد کانالهای فیلتر نوری افزایش می یابد، ثانیا، فرکانس و میزان عبور کانالهای نوری با تغییر انرژی فرمی قابل کنترل است و رفتاری مشابه با آنچه در حالت $N=٤$ اتفاق افتاد، از خود نشان می دهد.



شکل۵: طیف عبوری ساختار پیشنهادی با تعداد دوره $N=۵$ به ازای انرژی فرمی ۸۰ میلی الکترون ولت.

نتیجه گیری

در این مقاله، فیلترهای نوری چند کاناله مبتنی بر بلور فوتونی فیبوناچی یک بعدی مرتبه سوم شامل شبه فلز دیراک طراحی و پیشنهاد شده است. با تغییر انرژی فرمی شبه فلز دیراک، فرکانس و میزان عبور کانال های نوری ایجاد شده در بازه فرکانسی تراهرتز تغییرات قابل ملاحظه ای داشتند. همچنین اثر زاویه تابش موج فرودی باعث تغییر در موقعیت فرکانسی و میزان عبور کانالهای نوری گردید. تغییر در تعداد دوره ساختار فیبوناچی طراحی شده موجب افزایش تعداد کانالهای نوری گردید. نتایج حاصل را می توان در طراحی فیلترهای نوری چندکاناله تنظیم پذیر برای شبکه های تمام–نوری مورد بهره برداری قرار داد.

مرجع‌ها

[۱] A. Massaro; "*Photonic Crystals: Introduction, Application and Theory*"; Intech Open. (۲۰۱۲) ٦۳-۷۸.
[۲] H. Alipour-Banaei and F. Mehdizadeh; "Significant role of photonic crystal resonant cavities in DWM and DWDM communication tunable filters"; *Optik* ۱۲٤, (۲۰۱۳) ۲٦۳۹-۲٦٤٤.
[۳] G. P. Agrawal; "*Fiber-Optic Communications Systems*"; John Wiley & Sons (۲۰۰۱) ۱۳۵-۱۳۷.
[٤] S. John; "Strong localization of photons in certain disordered dielectric supperlattices"; *Phys. Rev. Lett.* ۵۸, (۱۹۸۷) ۲٤۸٦-۲٤۸۹.
[۵] H. Alipour-Banaei and F. Mehdizadeh; "A proposal for anti-UVB filter based on one dimensional photonic crystal structure"; *J. Nanomat. Biostruc.* ۷, (۲۰۱۲) ۳٦۷-۳۷۱.
[٦] Z. K. Liu, *et al.*; "A stable three dimensional topological Dirac semimetal Cd۳As۲"; *Nat. Mater.* ۱۳, (۲۰۱٤) ٦۷۷-٦۸۱.
[۷] X. Deng, J. Liu, J. Yuan, Q. Lio, N. Liu; "A new transfer matrix method to calculate the optical absorption of graphene"; *Euro. Phys. Lett.* ۱۰۲, (۲۰۱۵) ۲۷۰۰۲.
[۸] Q. Wang, and Zhang; "Tunable narrow terahertz absorption of one-dimensional photonic crystals embedded with Dirac semimetal-dielectric defect layers"; *Appl.Opt.* ۵۸, (۲۰۱۹) ۸٤۸٦.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تصحیحات تابشی مرتبه NLO در توزیع انرژی B- هادرون حاصل از واپاشی بوزون هیگز باردار سنگین در رهیافت جرم عمومی

سرتیپی یاراحمدی، پگاه[۱]؛ موسوی نژاد، سید محمد[۱]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد، یزد

چکیده

در این مقاله، یک کانال پیشنهادی برای جستجوی هیگز باردار سنگین را مطالعه می‌کنیم. مطابق با آن، با مطالعه طیف انرژی مزون‌های با طعم کوارک ته (bottom) که از واپاشی هیگز باردار سنگین تولید می‌شوند، می‌توان به شواهدی برای وجود هیگز باردار دست یافت. در محاسباتمان جرم کوارک ته را حفظ می کنیم و نتایج را با محاسبات اخیر که در آن از جرم کوارک ته صرفنظر شده است مقایسه خواهیم کرد. نشان می‌دهیم حفظ جرم کوارک ته، نتایج را بطور چشمگیر تغییر خواهد داد.

NLO corrections to the B-hadron energy distribution of Heavy Charged Higgs Boson decay through general massive scheme

Sartipi Yarahmadi, Pegah [1]; Moosavi Nejad, Seyed Mohammad [1]

[1] *Department of Physics, University of Yazd, Yazd*

Abstract

In this work, a proposed channel to search for heavy charged Higgs boson is studied. In this regard, we study the energy spectrum of bottom flavored hadrons created in heavy charged Higgs decays. This could be an evidence for the presence of charged Higgs. In our calculation we preserve the bottom quark mass from the beginning and compare with the published results in which the b-quark mass is ignored. We will show that the results are dependent to the b-quark mass extremely so b-quark mass cannot be ignored.

PACS No. ۱۳

مقدمه

علی‌رغم همه موفقیت‌های مدل استاندارد، اشکالات و سوالاتی در این مدل بی پاسخ مانده است. لذا مدل‌های مختلفی فراتر از مدل استاندارد برای حل مشکلات این مدل به کار گرفته شده‌اند. از جمله این مدلها مدل هیگز دوگانه (2HDM) است که شامل میدان دوتایی هیگز اسکالر (H_1 و H_2) است که منجر به بروز سه بوزون هیگز خنثای فیزیکی(h، H، A) و یک جفت بوزون هیگز باردار $H^{\pm}$ می‌شود. از آنجایی که هیچ بوزون اسکالر بارداری در مدل استاندارد وجود ندارد، پس کشف هر بوزون اسکالر باردار مدرک معتبری بر وجود مدلی ورای مدل استاندارد خواهد بود.

در مرجع [۱]، در چارچوب 2HDM به محاسبه طیف انرژی B- مزون‌ها (مزونهایی با طعم کوارک ته) حاصل از واپاشی بوزون هیگز باردار ($H^+ \to \bar{b}t \to B+X$) در رهیافت بدون جرم (Zero-mass) پرداختیم که در آن از جرم کوارک ته در محاسبات صرفنظر کردیم. در کار حاضر و در رهیافت General-mass (جرم عمومی) با حفظ جرم کوارک ته، نتایج پیشین را اصلاح کرده و نشان خواهیم داد که اثر جرم کوارک ته منجر به نتایج بسیار متفاوتی برای طیف انرژی مزون B می‌شود. مطالعه طیف انرژی این مزون می‌تواند کانالی برای مطالعه و کشف بوزون هیگز باردار و در نتیجه فیزیک جدید باشد.

نرخ واپاشی $\Gamma(H^+ \to t\bar{b})$ در مرتبه بورن در 2HDM

برای محاسبه طیف انرژی B-هادرون‌های تولید شده از واپاشی بوزون هیگز باردار سنگین ابتدا باید تصحیحات تابشی نرخ واپاشی دیفرانسیلی $d\Gamma(H^+ \to t\bar{b})/dx_a (a=b,g)$ را بدست آوریم که در آن x_a متناظر با انرژی پارتون تولید شده است. در تئوری 2HDM دو احتمال برای جفت شدن دوتایی‌های هیگز وجود دارد. در

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

سناریوی اول (مدل I)، یکی از دوتایی‌ها (H_1) با همه بوزون‌ها و دیگری(H_2) با همه کوارک‌ها جفت می‌شود. در سناریوی دوم (مدل II)، دوتایی H_2 با کوارک‌های بالای راستگرد و دوتایی H_1 با کوارک‌های پایینی راستگرد جفت می‌شوند. در چارچوب سکون بوزون هیگز برای نرخ واپاشی داریم :

$$\tilde{\Gamma}_0 = \frac{N_c M_H}{8\pi}\lambda^{\frac{1}{2}}(1,R,Y)\left[2(a^2+b^2)(S-R)-2(a^2-b^2)\sqrt{RY}\right] \quad (۱)$$

که $N_C = 3$ فاکتور رنگ و $\lambda(x,y,z)=(x-y-z)^2-4yz$ است. همچنین پارامتر $S=(1+R-y)/2$ را تعریف کرده‌ایم که در آن $R=(m_b/m_H)^2, y=(m_t/m_H)^2$. نتیجه (۱) در تطابق کامل با نتیجه مرجع [۲] است.

تصحیحات تابشی مجازی

تصحیحات تابشی مجازی در رأس H^+tb شامل واگرایی‌های فرابنفش(UV) و مادون قرمز(IR) است که به ترتیب از نشر گلوئون مجازی سخت و نرم ناشی می‌شوند. برای رفع تکینگی‌ها، طرح منظم‌سازی ابعادی را اعمال می‌کنیم که در آن $D=4-2\varepsilon$ برای بعد فضا-زمان پذیرفته می‌شود. سهم تابش گلوئون مجازی در محاسبه نرخ واپاشی دیفرانسیلی به صورت زیر است:

$$\frac{d\tilde{\Gamma}_b^{vir}}{dx_b} = \frac{Q}{8m_H\pi}\overline{|M^{vir}|^2}\delta(1-x_b). \quad (۲)$$

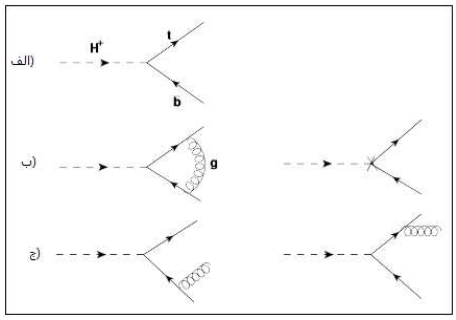
در رابطه فوق، $\overline{|M^{vir}|^2} = \sum_{spin}\left(M_0^{\dagger}M_{loop}+M_{loop}^{\dagger}M_0\right)$ که M_0 دامنه مرتبه بورن است و $M_{loop}=v_b(\Lambda_{ct}+\Lambda_1)(a+b\gamma^5)\bar{u}_t$ دامنه بازبهنجار شده تصحیحات مجازی است که در آن Λ_{ct} ناشی از بازبهنجارش جرم و میدان بوده و Λ_1 عبارت مربوط به تصحیح رأس است. نمودارهای فاینمن این تصحیحات در شکل ۱ نشان داده شده است. پیرو رهیافت بکار گرفته شده در مرجع [۳] داریم:

$$\Lambda_{ct} = (a+b)\left(\frac{\delta Z_b}{2}+\frac{\delta Z_t}{2}-\frac{\delta m_t}{m_t}\right)\frac{1+\gamma_5}{2} + (a-b)\left(\frac{\delta Z_b}{2}+\frac{\delta Z_t}{2}-\frac{\delta m_b}{m_b}\right)\frac{1-\gamma_5}{2} \quad (۳)$$

همچنین برای تصحیح رأس داریم:

$$\Lambda_1 = \frac{N_C\alpha_s m_H^2 C_F}{\pi}\left[(a^2-b^2)\sqrt{RY}G_+ + (a^2+b\ )G_-\right], \quad (٤)$$

که در آن G_+ و G_- شامل انتگرال‌های دو نقطه‌ای و سه نقطه‌ای پازارینو-ولتمن هستند [٤]. با جمع تصحیحات مجازی، تکینگی‌های UV از بین می‌روند اما تکینگی‌های IR باقی می‌مانند که از این به بعد با ϵ برچسب‌گذاری می‌شوند.



شکل۱ : نمودار فاینمن تصحیحات تابشی در مرتبه NLO برای واپاشی $H^+\to t\bar{b}$ الف) سهم مرتبه بورن. ب) تصحیح رأس، بازبهنجارش جرم و میدان . ج) نشر گلوئون حقیقی

در نهایت، سهم تصحیحات مجازی در نرخ واپاشی دیفرانسیلی عبارت است از:

$$\frac{d\tilde{\Gamma}_b^{vir}}{dx_b} = \tilde{\Gamma}_0\frac{\alpha_s(\mu_R)}{2\pi}C_F\delta(1-x_b)\Big\{-2+(1-2S)\ln\frac{R}{y}+ \frac{1}{a^2-b^2-(a^2-b^2)\eta}\Big(3ab\eta\frac{R}{y}+\frac{2Q\ln x_s}{R-S}\Big[(a^2+b^2)\eta(R+y) -2(a^2-b^2)(R-S)\Big]\Big)-2\Big[1-\frac{R-S}{Q}\ln x_s\Big]\Big(\ln\frac{4\pi\mu_F^4}{m_t m_b}-\gamma_E+\frac{1}{\varepsilon}\Big) +\frac{S-R}{Q}\Big[2Li_2(1-\frac{m_b}{m_t}x_s)+2Li_2(1-\frac{m_t}{m_b}x_s)-\frac{\pi^2}{3}-\ln^2 x_s +\frac{1}{4}\ln x_s+\frac{1}{4}\ln^2\frac{R}{y}+4\ln x_s\ln(1-x_s^2)+2Li_2(x_s^2)\Big], \quad (۵)$$

که $Q=\sqrt{S^2-R}$ و $\eta=(S-R)/\sqrt{Ry}$, $x_s=(Q+R-S)/\sqrt{Ry}$. ضرایب a و b در مرجع [۱] معرفی شده اند.

تصحیحات حقیقی

تصحیحات تابشی گلوئون حقیقی برای حذف تکینگی‌های باقی‌مانده ضروری است. پس از اعمال منظم‌سازی ابعادی، با محاسبه دامنه نشر گلوئون حقیقی و در نظر گرفتن عنصر فضای فاز، نرخ واپاشی دیفرانسیلی عبارت است از:

$$d\tilde{\Gamma}^{real} = \frac{\mu_F^{2(4-D)}}{2m_H}\overline{|M^{real}|^2}dPS(p_t,p_b,p_g,p_{H^+}) \quad (٦)$$

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

برای محاسبه $d\Gamma_b^{real}/dx_b$ تکانه کوارک ته را ثابت گرفته و روی انرژی گلوئون در محدوده زیر انتگرال می‌گیریم:

$$\frac{(1-x_b)(1-Sx_b-H)}{1+R-2Sx_b} \le x_g \le \frac{(1-x_b)(1-Sx_b+H)}{1+R-2Sx_b}$$
$$H = S\sqrt{x_b^2-\beta^2} \qquad (۷)$$

نتایج تحلیلی برای $d\Gamma/dx_i$

با صرفه‌نظر از جزئیات، با جمع سهم‌های ناشی از مرتبه بورن، نشر گلوئونهای حقیقی و مجازی نتیجه زیر را برای نرخ واپاشی دیفرانسیل $H^+ \to t\bar{b}$ در مرتبه NLO به دست می‌آوریم:

$$\frac{1}{\bar{\Gamma}_0}\frac{d\bar{\Gamma}_b}{dx_b} = \delta(1-x_b)+\frac{C_F\alpha_s(\mu_R)}{2\pi}\{\delta(1-x_b)$$
$$[(y-R)\ln R + 2(1+S)\ln y + \frac{S-R}{2Q}\ln^2\frac{R}{y}$$
$$-\ln(8Q^2)+\frac{1}{\eta(a^2+b^2)-(a^2-b^2)}(-3ab\eta\ln\frac{R}{y}$$
$$+2Q\ln x_s\left[2(a^2-b^2)+(a^2+b^2)\frac{R+y}{\sqrt{Ry}}\right])$$
$$+\frac{2(S-R)}{Q}[Li_2(1-\frac{m_b}{m_t}x_s)+Li_2(1-\frac{m_t}{m_b}x_s)-Li_2(1-x_s^2)$$
$$-\ln x_s-\frac{1}{2}\ln^2\frac{m_b x_s}{m_t}+2(1+\frac{S-R}{Q}\ln x_s)\ln\frac{1+\beta}{1-\beta}]$$
$$+\frac{a^2+b^2}{a^2-b^2-\eta(a^2+b^2)}\left[4\frac{a^2-b^2}{a^2+b^2}\times\frac{Q-S\sqrt{x_b^2+\beta^2}}{Q(1-x_b)}-\right.$$
$$\frac{4\eta}{1-x_b}+\frac{2S\sqrt{x_b^2-\beta^2}}{Q(R-S)(1+R-2Sx_b)^2}(S^3(1-x_b)(10-3x_b)$$
$$+\frac{2y^2(y-1)}{1-x_b}-S^2x_b(9y-7)+S^2(17y-7)-\frac{2S_y}{1-x_b}[4-$$
$$5y+4x_b(y-1)])]+\frac{2}{Q(a^2-b^2-(a^2+b^2)\eta)}\times$$
$$\ln\frac{R-S(x_b-\sqrt{x_b^2-\beta^2})}{R-S(x_b+\sqrt{x_b^2-\beta^2})}\left[\frac{R-Sx_b}{1-x_b}(a^2-b^2)+\right.$$
$$\left.\left.\frac{a^2-b^2}{\sqrt{Ry}}\left[\frac{S^2(1+x_b)}{2}+\frac{R-S^2x_b^2-RS(1+x_b)}{(1+x_b)_+}\right]\right\}\right. \qquad (۸)$$

برای داشتن دقیق‌ترین طیف انرژی مزون B، به محاسبه سهم نرخ دیفرانسیلی واپاشی گلوئون نیز نیاز داریم. با تثبیت تکانه گلوئون، بر روی تکانه کوارک ته انتگرال گرفته و داریم:

$$\frac{1}{\bar{\Gamma}_0}\frac{d\bar{\Gamma}_g}{dx_g} = \frac{C_F\alpha_s(\mu_R)}{2\pi Qx_g}\{-4S(1-x_g)F+$$
$$\frac{1}{(R-S)(b^2-a^2+\eta(a^2+b^2))}[2(a^2-b^2)(S-R)(R-S+$$
$$Sx_g)+\eta(a^2+b^2)(2R^2+2RS(x_g-2)+S^2(x_g^2-2x_g+2)]$$
$$\times\left(\ln\frac{1-F}{1+F}-\ln\frac{x_g-Sx_g[1+x_g+(x_g-1)F]}{x_g-Sx_g[1+x_g-(x_g-1)F]}\right)\},$$
$$F=\sqrt{1-\beta^2(1-2Sx_g)/(1-x_g)^2} \qquad (۹)$$

رهیافت جرم عمومی(GM-VFN)

ابزار کلیدی برای محاسبه نرخ واپاشی دیفرانسیلی $H^+ \to t\bar{b}$ قضیه جداسازی است [۵] که به صورت زیر بیان می شود:

$$\frac{d\Gamma}{dx_B} = \sum_{i=b,g}\int_{x_i^{min}}^{x_i^{max}}\frac{dx_i}{x_i}\frac{d\Gamma_i^{GM}}{dx_i}(\mu_R,\mu_F)D_i^B(\frac{x_B}{x_i},\mu_F), \qquad (۱۰)$$

که x_B متناظر با انرژی مزون خروجی است. در مرجع [۱]، کمیت $d\Gamma(H^+\to t\bar{b})/dx_a$ را در مرتبه NLO و در رهیافت بدون جرم (ZM) با فرض $m_b=0$ محاسبه کردیم که در آن $a=b,g$. این رهیافت در عین سادگی منجر به حذف تمام اطلاعات در مورد وابستگی نرخ واپاشی دیفرانسیلی به جرم کوارک ته می‌شود. در بخش قبل از رهیافتی استفاده کردیم که حاوی وابستگی کامل جرم کوارک ته است. رهیافت جرم عمومی (GM) یک رویکرد پیچیده است که منجر به بروز عبارات لگاریتمی بزرگ می‌شود. این عبارات بزرگ با معرفی جملات کاهشی مناسب از بین خواهند رفت. جملات کاهشی به صورت زیر به دست می آیند:

$$\frac{1}{\Gamma_0}\frac{d\Gamma_i^{sub}}{dx_i} = \lim_{m_b\to 0}\frac{1}{\bar{\Gamma}_0}\frac{d\bar{\Gamma}_i^{FFN}}{dx_i}-\frac{1}{\hat{\Gamma}_0}\frac{d\hat{\Gamma}_i^{ZM}}{dx_i} \qquad (۱۱)$$

لذا عبارت نرخ واپاشی مناسب در رهیافت جرم عمومی عبارت است از:

$$\frac{1}{\Gamma_0}\frac{d\Gamma_i^{GM}}{dx_i} = \frac{1}{\bar{\Gamma}_0}\frac{d\bar{\Gamma}_i^{FFN}}{dx_i}-\frac{1}{\Gamma_0}\frac{d\Gamma_i^{sub}}{dx_i} \qquad (۱۲)$$

با گرفتن حد $m_b \to 0$ در معادلات (۸ و۹)، عبارت‌های زیر را برای جملات کاهشی بدست می آوریم:

$$\frac{1}{\Gamma_0}\frac{d\Gamma_b^{sub}}{dx_b} = -\frac{\alpha_s(\mu_R)C_F}{2\pi}\left\{\frac{1+x_b^2}{1-x_b^2}[\ln R+2\ln(1-x_b)+1]\right\}_+, \qquad (۱۲)$$

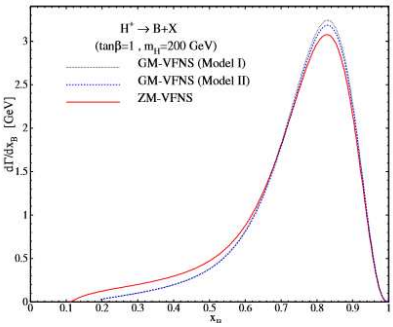
$$\frac{1}{\Gamma_0}\frac{d\Gamma_g^{sub}}{dx_g} = -\frac{\alpha_s(\mu_R)C_F}{2\pi}\left\{\frac{1+(1-x_g^2)^2}{1-x_g^2}\left[\ln R+\ln\frac{4S(1-x_g)}{x_g\sqrt{1-2Sx_g}}\right]+\frac{(2-x_g)^2}{2x_g}\right\}.$$

نتایج عددی

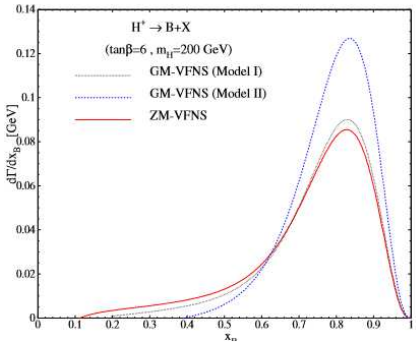
در این بخش، پیش‌بینی‌های پدیده‌شناختی خود را ارائه می‌کنیم. محاسبات خود را محدود به نواحی مجاز فضای پارامتری $m_{H^+}-\tan\beta$ (حاصل از آزمایش‌های CMS) خواهیم کرد. برای پارامترهای ورودی مقادیر $m_t=172.98GeV, m_b=4.5GeV$ را در نظرمی گیریم. در رابطه(۱۰)، به توابع ترکش غیراختلالی که

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

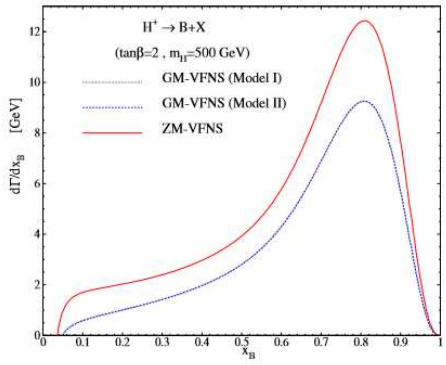
توصیف‌کننده فرآیندهای هادرون‌سازی است هم نیاز داریم. از رویکرد مورد استفاده در مرجع [۳]، یعنی مدل توانی $D_b(z,\mu_F^{ini}) = Nz^{\alpha}(1-z)^{\beta}$ استفاده می‌کنیم. پارامترهای آزاد در مقیاس اولیه $\mu_F^{ini} = 4.5\,GeV$ مشخص شده‌اند. از نتیجه برازش این تابع با داده‌های آزمایشگاهی مقادیر $N = 2575.014$ ، $\alpha = 15.424$ و $\beta = 2.394$ به دست آمده داشت. در شکلهای ۲ و ۳، طیف انرژی مزون B در رهیافت‌های GM و ZM به ازای $\tan\beta = 1,6$ و $m_H = 200GeV$ با هم مقایسه شده‌اند. در شکل۲ مشاهده می‌شود که نتایج هر دو مدل در طرح GM با طرح ZM تقریباً یکسان است. اما شکل ۳ ($\tan\beta = 6$) نشان می‌دهد که طیف انرژی در رهیافت ZM و GM (در مدل I) تقریباً یکسان است در حالی که دررهیافت GM برای مدل II کاملاً متفاوت است. در شکل ٤ و ٥ طیف انرژی مزون را در هر دو رهیافت با فرض $\tan\beta = 2,6$ و $m_H = 500GeV$ مطالعه کرده‌ایم. مشاهده می‌شود برای هیگز سنگین‌تر، نتایج رهیافت GM کاملاً با نتایج به‌دست‌آمده در ZM متفاوت است. پس، تقریب بدون جرم همیشه به خوبی کار نمی‌کند و قابل اطمینان‌ترین پیش‌بینی‌ها در مرتبه NLO در رهیافت GM است که در آن جرم کوارک حفظ میشود.



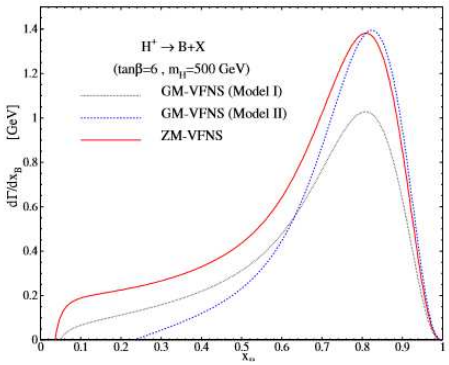
شکل۲: طیف انرژی مزون B در واپاشی هیگز باردار در مرتبه NLO. نتایج GM در سناریو I و II با نتایج رهیافت ZM مقایسه شده است.



شکل۳ : همانند شکل ۲ اما با M_H=200 , tanβ=6



شکل٤ : همانند شکلهای ۲ و ۳ اما با M_H=500 , tanβ=2



شکل٥ : طیف انرژی مزون B در واپاشی هیگز باردار با M_H=500 , tanβ=6

نتیجه گیری

جستجو برای بوزون‌های هیگز باردار از اهداف اصلی بسیاری از برخورددهنده‌های ذرات در سال‌های اخیر بوده است. در کار حاضر، کانال واپاشی $H^+ \to t\bar{b}$ را در رهیافت جرم عمومی با حفظ جرم کوارک ته، مطالعه کردیم. نشان دادیم، نتایج برای دو سناریو با نتایج به دست آمده در طرح بدون جرم کاملاً متفاوت است، به‌ویژه زمانی که m_H بزرگ باشد. انتظار می رود مطالعه کانال پیشنهادی در جستجوی LHC برای هیگز باردار کمک کند.

مرجع‌ها

[۱] Moosavi Nejad and P. Sartipi Yarahmadi, "Probing heavy charged Higgs bosons through bottom hadrons in the $H^+ \to t\bar{b} \to BX$ channel in 2HDM," Eur. Phys. J. C 81 (2021) no.4, 308.

[۲] C. S. Li and R. J. Oakes, "QCD corrections to the hadronic decay width of a charged Higgs boson," Phys. Rev. D 43 (1991) 855.

[۳] A. Kadeer, J. G. Körner, and M. C. Mauser, "A Phenomenological Study of Bottom Quark Fragmentation in Top Quark", Eur. Phys. J. C 54, 175 (2008).

[٤] S. Dittmaier, "Separation of soft and collinear singularities from one loop N point integrals," Nucl. Phys. B 675, 447 (2003)

[٥] B. A. Kniehl, G. Kramer, I. Schienbein and H. Spiesberger, "Reconciling open charm production at the Fermilab Tevatron with QCD," Phys. Rev. Lett. 96, 012001 (2006).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

ترابرد درهم‌تنیدگی یک سامانهٔ دوکیوبیتی در حضور میدان مغناطیسی خارجی در چارچوب‌های نالخت

حمزه عوفی، رضا[۱] ؛ افشار، داود[۱،۲]؛ اشرف پور، مهرزاد[۱،۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشکدهٔ علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز

[۲] مرکز تحقیقات لیزر و پلاسما، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز

چکیده

در این مقاله ترابرد یک حالت درهم‌تنیده که در چارچوب نالخت قرار دارد توسط سامانهٔ هایزنبرگ دوکیوبیتی XXX در حضور میدان مغناطیسی خارجی یکنواخت برای دو حالت فرومغناطیس و آنتی‌فرومغناطیس بررسی شده است. مشاهده می‌شود با افزایش پارامتر شتاب و دما فاصلهٔ رد حالت ورودی و خروجی از کانال کوانتومی افزایش پیدا می‌کند که به معنای افت کیفیت ترابرد درهم‌تنیدگی است. در حالت آنتی فرومغناطیس تغییر میدان مغناطیسی یکنواخت در بازه‌های خاص تأثیری روی کیفیت ترابرد کوانتومی ندارد ولی خارج از آن بازه کیفیت ترابرد درهم‌تنیدگی به یک باره با شیب تند کاهش می‌یابد.

واژه های کلیدی: *ترابرد درهم‌تنیدگی، چارچوب شتاب‌دار، اثر آنرو*

Entanglement teleportation of a two-qubit system in the presence of external magnetic field in non-inertial frames

Hamzeh Ofi, Reza[1]; Afshar, Davood[1,2]; Ashrafpour, Mehrzad[1,2]

[1] Department of Physics, Faculty of science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz
[2]Center for research on laser and plasma, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz

Abstract

In this paper, the teleportation of a non-inertial entangled state is investigated with the use of a two-qubit Heisenberg XXX system in the presence of a uniform external magnetic field for both ferromagnetic and antiferromagnetic cases. It is observed that with the increase of the acceleration and temperature, the trace distance between the input and output state of the quantum channel increases, which means a decrease in the quality of the entanglement teleportation. In the antiferromagnetic case, the change in the magnetic field at certain intervals has no effect on the quality of the quantum teleportation, but outside of that range, the quality of the entanglement teleportation is sharply reduced.

***Keywords**: entanglement teleportation, non-inertial frame, Unruh effect*

PACS No, 2

۱. مقدمه

در سال‌های اخیر پروهش‌های زیادی در مورد ترابرد کوانتومی انجام شده است و اخیراً توجه محققان به ترابرد کوانتومی در چارچوب‌های شتابدار جلب شده است که در آن فرستنده یا گیرندهٔ اطلاعات شتاب یکنواخت دارند [۳-۱]. همچنین به تازگی حالتی در نظر گرفته شده است که در آن فرستنده و گیرندهٔ اطلاعات در چارچوب لخت و حالت ناشناس در چارچوب نالخت با شتاب یکنواخت قرار دارد [٤]. در این تحقیقات، محققان به دنبال مشاهدهٔ رفتار درهم‌تنیدگی و کیفیت ترابرد کوانتومی از دید ناظر در حین ظهور اثر آنرو بودند.

در این پژوهش یک سامانهٔ هایزنبرگ XXX تحت برهم‌کنش یک میدان مغناطیسی خارجی به عنوان کانال کوانتومی در نظر گرفته شده است و ترابرد یک حالت درهم‌تنیده در چارچوب نالخت مورد بررسی قرار رفته است. از این رو در بخش ۲ پس از معرفی مدل، فاصلهٔ رد را به عنوان سنجهٔ کیفیت ترابرد مورد استفاده قرار

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

می‌دهیم. سپس در بخش ۳ به تحلیل نتایج پرداخته و در بخش ٤ نتیجه‌گیری را می‌آوریم.

۲. مدل و سنجهٔ مورد استفاده

مدل مورد نظر، شامل یک سامانهٔ هایزنبرگ XXX تحت برهم‌کنش با یک میدان مغناطیسی خارجی می‌باشد. برای سادگی فرض می‌کنیم میدان مغناطیسی در جهت Z است. پس هامیلتونی این مدل به صورت زیر خواهد بود.

$$H=\frac{1}{2}[J(\sigma_1^x\otimes\sigma_2^x+\sigma_1^y\otimes\sigma_2^y+\sigma_1^z\otimes\sigma_2^z)+B(\sigma_1^z+\sigma_2^z)] \quad (۱)$$

که در آن B اندازهٔ میدان مغناطیسی، $\sigma_1^i,\sigma_2^i(i=x,y,z)$ ماتریس‌های پائولی برای ذرات اول و دوم و J ثابت جفت‌شدگی اسپینی هستند. $J>0$ متناسب با حالت آنتی‌فرومغناطیس و $J<0$ متناسب با حالت فرومغناطیس است.

شکل ماتریسی هامیلتونی به‌صورت زیر خواهد بود.

$$H=\begin{bmatrix}\frac{1}{2}(2B+J) & 0 & 0 & 0\\ 0 & -\frac{1}{2}J & J & 0\\ 0 & J & -\frac{1}{2}J & 0\\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(-2B+J)\end{bmatrix} \quad (۲)$$

در تعادل گرمایی حالت یک سیستم توسط معادلهٔ گیبس محاسبه می‌شود.

$$\rho(T)=\frac{e^{-\beta H}}{tr(e^{-\beta H})} \quad (۳)$$

در معادلهٔ بالا H هامیلتونی سیستم و $\beta=\frac{1}{KT}$ است که در آن K و T به ترتیب نمایانگر ثابت بولتزمان و دما هستند. برای سادگی فرض می‌کنیم $K=1$ است. با جایگذاری هامیلتونی سیستم در معادلهٔ گیبس، ماتریس چگالی سیستم در تعادل گرمایی بر حسب پایه‌های استاندارد $\{|0,0\rangle,|0,1\rangle,|1,0\rangle,|1,1\rangle\}$ به‌صورت زیر است:

$$\rho(T)=\begin{bmatrix}1/A & 0 & 0 & 0\\ 0 & C & 1/B & 0\\ 0 & 1/B & C & 0\\ 0 & 0 & 0 & e^{\frac{2B}{T}}/A\end{bmatrix} \quad (٤)$$

که در آن A، B و C عبارتند از: $A=1+e^{\frac{B}{T}}+e^{\frac{2B}{T}}+e^{\frac{B+2J}{T}}$،

$B=-2+\frac{4+4\mathrm{Cosh}(\frac{B}{T})}{1-e^{\frac{2J}{T}}}$ و $C=\frac{1}{2}-\frac{1+e^{\frac{2B}{T}}}{2A}$.

اینک ترابرد کوانتومی حالت درهم‌تنیدهٔ $|\Phi_{in}\rangle=\mathrm{Cos}\frac{\theta}{2}|10\rangle+e^{i\varphi}\mathrm{Sin}\frac{\theta}{2}|01\rangle,(0\le\theta\le\pi,0\le\varphi\le2\pi)$ که در یک چارچوب نالخت با شتاب یکنواخت قرار دارد را در نظر می‌گیریم و از (٤) به عنوان کانال کوانتومی استفاده می‌کنیم. همچنین فرض می‌کنیم فرستنده و گیرندهٔ اطلاعات و کانال کوانتومی همگی در چارچوب لخت قرار دارند. می‌دانیم برای تحلیل یک سیستم در چهارچوب لخت مختصات مینکوفسکی بهترین است ولی چنانچه ذره‌ای در چارچوب نالخت قرار دارد مناسب است از مختصات ریندلر استفاده کنیم. تبدیلات مختصات مینکوفسکی به ریندلر برای یک میدان فرمیونی به‌صورت زیر است [۵]:

$$|0\rangle_M=\mathrm{Cos}\,r_i|0_\omega\rangle_{\mathrm{I}}|0_\omega\rangle_{\mathrm{II}}+\mathrm{Sin}\,r_i|1_\omega\rangle_{\mathrm{I}}|1_\omega\rangle_{\mathrm{II}} \quad (۵)$$
$$|1\rangle_M=|1_\omega\rangle_{\mathrm{I}}|0_\omega\rangle_{\mathrm{II}}$$

در رابطهٔ بالا $\mathrm{Cos}\,r_i=(e^{-2\pi\omega_i c/a_i})^{-1/2}$ است که در آن r_i و ω_i به ترتیب شتاب و فرکانس کیوبیت iام را نشان می‌دهند و c سرعت نور است. همچنین برای $a\in[0,\infty)$ محدودهٔ پارامتر شتاب $r_i\in[0,\frac{\pi}{4})$ است. اندیس‌های I و II بیانگر مدهای ریندلر در نواحی کاملاً مستقل در فضا-زمان ریندلر می‌باشند. از آنجا که حالت کوانتومی $|\Phi_{in}\rangle$ در یک چارچوب نالخت قرار دارد با اعمال تبدیلات مختصات از مینکوفسکی به ریندلر و پس از گرفتن رد نسبت به ناحیهٔ غیرقابل دسترس II، حالت ورودی در چارچوب نالخت به‌شکل زیر به‌دست می‌آید:

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$$\rho_{in}=\begin{bmatrix}(\mathrm{Cos}\frac{\theta}{2}\mathrm{Sin}\,r)^2 & 0 & 0 & 0\\ 0 & (\mathrm{Cos}\frac{\theta}{2}\mathrm{Cos}\,r)^2 & D & 0\\ 0 & D^* & \mathrm{Sin}^2\frac{\theta}{2} & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\end{bmatrix} \quad (٦)$$

که در آن $D=\frac{1}{2}\mathrm{Sin}\,\theta\,\mathrm{Cos}\,r\,e^{-i\varphi}$ است.

از سوی دیگر حالت خروجی از کانال کوانتومی را می‌توان از رابطهٔ زیر بدست آورد [٦]:

$$\rho_{out}=\sum_{\mu\nu}p_{\mu\nu}(\sigma_\mu\otimes\sigma_\nu)\rho_{in}(\sigma_\mu\otimes\sigma_\nu) \quad (٧)$$

که در آن $\sigma_\mu,\sigma_\nu(\mu,\nu=1,2,3)$ ماتریس‌های پائولی، σ_0 ماتریس همانی، و $p_{\mu\nu}$ عبارت است از:

$$p_{\mu\nu}=Tr[E^\mu\rho(t)]Tr[E^\nu\rho(t)].$$

که در آن: $\sum_{\mu\nu}p_{\mu\nu}=1$، $E^0=|\psi^-\rangle\langle\psi^-|$،

$E^1=|\phi^-\rangle\langle\phi^-|$، $E^2=|\phi^+\rangle\langle\phi^+|$، $E^3=|\psi^+\rangle\langle\psi^+|$،

$|\phi^\pm\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle\pm|11\rangle)$ و $|\psi^\pm\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle\pm|10\rangle)$.

بنابراین ماتریس چگالی حالت خروجی به‌شکل زیر است:

$$\rho_{out}=\frac{1}{W}\begin{bmatrix}\rho^{11} & 0 & 0 & 0\\ 0 & \rho^{22} & \rho^{23} & 0\\ 0 & (\rho^{23})^* & \rho^{33} & 0\\ 0 & 0 & 0 & \rho^{44}\end{bmatrix} \quad (٨)$$

که در آن:

$$\rho^{11}=\mathrm{Cos}^2\frac{\theta}{2}(X\,\mathrm{Cos}^2 r+e^{\frac{2B}{T}}Y\,\mathrm{Sin}^2 r)+X\,\mathrm{Sin}^2\frac{\theta}{2},$$

$$\rho^{22}=\mathrm{Cos}^2\frac{\theta}{2}(e^{\frac{2B}{T}}Y\,\mathrm{Cos}^2 r+X\,\mathrm{Sin}^2 r)+Z\,\mathrm{Sin}^2\frac{\theta}{2},$$

$$\rho^{23}=e^{\frac{2B}{T}-i\varphi}(\frac{1}{2}-e^{\frac{2J}{T}}+\frac{1}{2}e^{\frac{4J}{T}})\mathrm{Cos}\,r\,\mathrm{Sin}\,\theta,$$

$$\rho^{33}=\mathrm{Cos}^2\frac{\theta}{2}(Z\,\mathrm{Cos}^2 r+X\,\mathrm{Sin}^2 r)+e^{\frac{2B}{T}}Y\,\mathrm{Sin}^2\frac{\theta}{2},$$

$$\rho^{44}=\mathrm{Cos}^2\frac{\theta}{2}(X\,\mathrm{Cos}^2 r+Z\,\mathrm{Sin}^2 r)+X\,\mathrm{Sin}^2\frac{\theta}{2},$$

$Y=1+2e^{\frac{2J}{T}}+e^{\frac{4J}{T}}$، $X=e^{\frac{B}{T}}+e^{\frac{3B}{T}}+e^{\frac{B+2J}{T}}+e^{\frac{3B+2J}{T}}$،

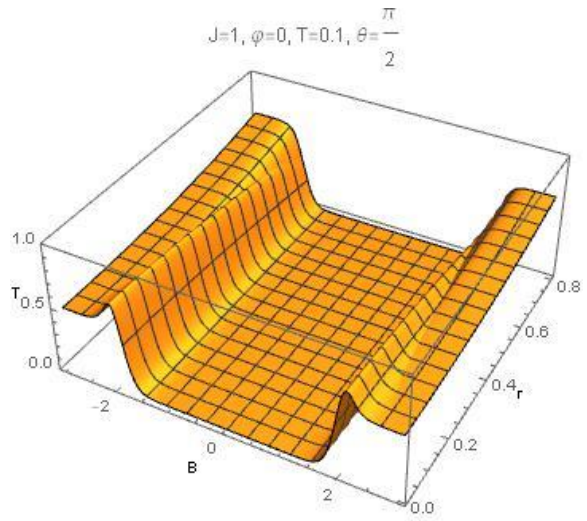
$W=(1+e^{\frac{B}{T}}+e^{\frac{2B}{T}}+e^{\frac{B+2J}{T}})^2$، $Z=1+2e^{\frac{2B}{T}}+e^{\frac{4B}{T}}$.

در این مقاله از فاصلهٔ رد به عنوان سنجهٔ مقایسهٔ حالت ورودی به کانال و خروجی از کانال کوانتومی استفاده کردیم. فاصلهٔ رد به صورت زیر تعریف می‌شود [٧]:

$$T(\rho_{out},\rho_{in})=\frac{1}{2}Tr[\sqrt{(\rho_{out}-\rho_{in})^\dagger(\rho_{out}-\rho_{in})}] \quad (٩)$$

۳. تحلیل نتایج

با جایگذاری روابط (٦) و (٨) در رابطهٔ (٩) فاصلهٔ رد به‌دست می‌آید. در ادامه با انتخاب پارامترهای $J=1$، $\varphi=0$، $T=0.1$ و $\theta=\pi/2$ برای حالت آنتی‌فرومغناطیس شکل ١ را رسم کرده‌ایم. مشاهده می‌شود در بازهٔ $-1.5<B<1.5$ حالت‌های ورودی و خروجی، مشابه می‌باشند. در بازه‌های دیگر با افت شدید و ناگهانی کیفیت ترابرد درهم‌تنیدگی روبه‌رو هستیم. همچنین با افزایش پارامتر شتاب در بازه‌های خارج از $-1.5<B<1.5$ کیفیت ترابرد با شیب ملایم کاهش می‌یابد.

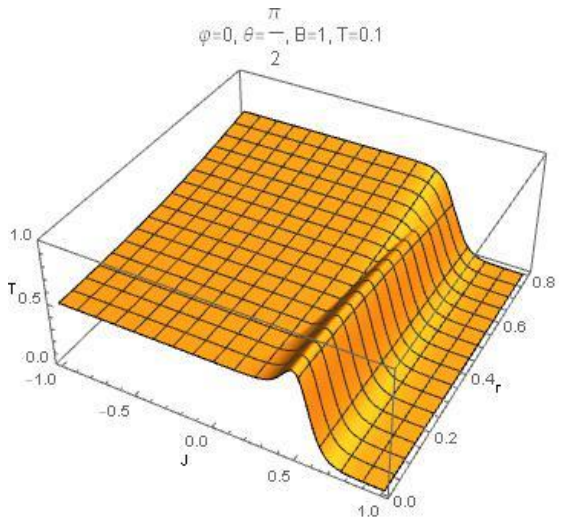


شکل ١: نمودار فاصلهٔ رد حالت آنتی‌فرومغناطیس نسبت به پارامتر شتاب r و میدان مغناطیسی B.

با انتخاب پارامترهای $B=1$، $\varphi=0$، $T=0.1$ و $\theta=\pi/2$ شکل ٢ را رسم کرده‌ایم. مشاهده می‌شود عموماً حالت آنتی‌فرومغناطیس برای مدل یاد شده کیفیت ترابرد بهتری را نسبت به حالت فرومغناطیس دارد. علاوه بر این در بازهٔ $J<0.5$ با افزایش

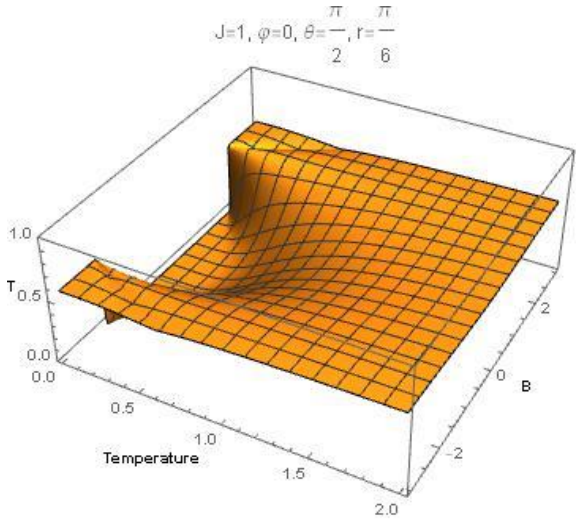
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

پارامتر شتاب شاهد کاهش ملایم کیفیت ترابرد درهم‌تنیدگی هستیم.



شکل ۲: نمودار فاصلهٔ رد نسبت به پارامتر شتاب r و ثابت جفت‌شدگی اسپینی J

شکل ۳ را با در نظر گرفتن پارامترهای $J=1$، $\varphi=0$، $r=\pi/6$ و $\theta=\pi/2$ نسبت به دما و اندازهٔ میدان مغناطیسی رسم کردیم.



شکل ۳: نمودار فاصلهٔ رد نسبت به میدان مغناطیسی B و دما T .

مشاهده می‌شود افزایش دما کیفیت ترابرد درهم‌تنیدگی را به‌طور شدید کاهش می‌دهد. همچنین دیده می‌شود میدان مغناطیسی نیز تأثیر زیادی بر فاصلهٔ رد حالت ورودی به کانال و خروجی از کانال کوانتومی دارد به‌گونه‌ای که با افزایش شدت میدان مغناطیسی، کیفیت ترابرد درهم‌تنیدگی به‌طور ناگهانی کاهش می‌یابد.

٤. نتیجه‌گیری

در این مقاله رفتار ترابرد درهم‌تنیدگی یک سامانهٔ هایزنبرگ دو کیوبیتی XXX در چارچوب شتاب‌دار بررسی شد. افزایش پارامتر شتاب باعث افت کیفیت ترابرد درهم‌تنیدگی در بازه‌هایی که در آن فاصلهٔ رد حالت‌های ورودی و خروجی صفر نیست می‌شود. این بدان معنی است که در چارچوب‌های شتابدار افت کیفیت ترابرد درهم‌تنیدگی را شاهد هستیم. در این سامانه حالت آنتی-فرومغناطیس نسبت به حالت فرومغناطیس برای ترابرد اطلاعات بهتر عمل می‌کند. در غیاب میدان مغناطیسی، ویژه‌حالت‌های هامیلتونی، حالت‌های اسپینی سه‌گانه و یگانه هستند. هنگامی که جفت‌شدگی از نوع فرومغناطیس باشد حالت سه‌گانه حالت پایه سیستم است که دو حالت آن دارای درهم‌تنیدگی صفر و یکی درهم‌تنیدگی بیشینه دارد. در حضور میدان مغناطیسی، واگنی شکسته شده و حالت پایه ویژه‌حالتی است که درهم‌تنیدگی صفر دارد و در ترابرد حالت ضعیف عمل می کند. اما وقتی جفت‌شدگی از نوع آنتی‌فرومغناطیس باشد حالت پایه حالت یگانه با درهم تنیدگی بیشینه است. این حالت بهترین حالت برای ترابرد کوانتومی است. با این حال در حالت فرومغناطیس خارج از بازهٔ $-1.5<B<1.5$ با هم‌راستا شدن کیوبیت‌ها در راستای میدان مغناطیسی درهم‌تنیدگی کانال صفر می‌شود و کیفیت ترابرد کوانتومی به‌طور ناگهانی کاهش می‌یابد. طبق انتظار افزایش دما باعث کاهش کیفیت ترابرد کوانتومی می‌شود.

٥. منابع

[1] N. Metwally, Journal of the Optical Society of America B **30**, 233-237 (2012).

[2] Maohuai Xiang, Jiliang Jing, Journal of Quantum Information Science, **2**, 103-111 (2012).
[3] Xu Chen1 and Kam Wai Clifford Chan, Physical Review A **99**, 022334 (2019).
[4] C. Mo, G. F. Zhang, Results in Physics **21,** 103759 (2021).
[5] P. M. Alsing, I. Fuentes-Schuller, R. B. Mann, and T. E. Tessier, Physical Review A **74**, 032326 (2006).
[6] A. Peres, Physical Review Letters **77**, 1413 (1996).
[7] S. M. Barnett, "*Quantum Information*", Oxford University Press (2009).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

دوربری کوانتومی حالت نامعلوم یک کیوبیت بدون اندازه‌گیری حالت بل در حضور جفت‌شدگی قوی

جهانبخش، فرشید؛ توسلی، محمدکاظم؛ سلیمیان، سهیلا

گروه اپتیک و لیزر، دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد

چکیده

در این مقاله، طرحی که اخیرا برای دوربری حالت نامعلوم یک کیوبیت با استفاده از مدل جینز-کامینگز ارائه‌شده را توسعه می‌دهیم، به این معنا که در حضور جفت‌شدگی اتم- میدان قوی کار می‌کنیم، که در آن تقریب موج چرخان کنار گذاشته می‌شود. بنابراین، به جای مدل جینز-کامینگز از مدل رابی (شامل عبارات پادچرخان) استفاده می‌شود. در نهایت در راستای هدف‌مان، حالت نامعلوم مربوط به یک کیوبیت به کیوبیت دوم، اما بدون استفاده از تقریب موج چرخان و اندازه‌گیری حالت بل (که نوعا یک فرایند چالشی در پروتکل‌های اطلاعات کوانتومی است) دوربری شده است. لازم به ذکر است که این پروتکل با حداکثر میزان ممکن وفاداری و احتمال موفقیت کاملا قابل قبول ۰/۲۵ انجام شده است.

واژه‌های کلیدی: *جفت‌شدگی اتم-میدان قوی، مدل رابی، دوربری کوانتومی، وفاداری، احتمال موفقیت.*

Quantum teleportation of an unknown state of a qubit without Bell-state measurement in the presence of the strong coupling

Jahanbakhsh, Farshid; Tavassoly, Mohammad Kazem; Salimian, Soheila

Optics and Laser Group, Department of Physics, Yazd University

Abstract

In this paper, we extend the recently presented scheme for the teleportation of an unknown state of a qubit using the Jaynes-Cummings model, in the sense that we work in the presence of a strong atom-field coupling, wherein the rotating wave approximation has not been taken into account. Therefore, instead of the Jaynes-Cummings model, the Rabi model is utilized (the counter rotating terms are considered). Finally, to achieve our goal, the unknown state of a qubit is teleported to the second qubit, without using the rotating wave approximation and Bell-state measurement (which is a challenge in the quantum information protocols). It should be noted that this protocol has been done with the maximum possible amount of fidelity and satisfactory success probability of 0.25.

***Keywords**: Strong atom-field coupling, Rabi model, Quantum teleportation, Fidelity, Success probability.*

PACS No. ۳۲

مقدمه

انتقال یک حالت نامعلوم کوانتومی (مانند یک حالت اتمی یا میدان) از فرستنده به گیرنده، بدون انتقال فیزیکی اطلاعات توسط کانال‌های کوانتومی و کلاسیک را دوربری کوانتومی می‌نامند. این فرآیند که برای اولین بار توسط بنت و همکاران پیشنهاد شد [۱]، در دو دهه اخیر مورد توجه بسیاری از پژوهشگران حوزه اپتیک کوانتومی و فناوری‌های اطلاعات و ارتباطات کوانتومی قرار گرفته است [۲، ۳]. طرح‌های بسیاری در این راستا مطرح شده است، که عمدتا از مدل جینز-کامینگز (در حضور تقریب موج چرخان) استفاده شده است [٤]. لازم به ذکر است که تقریب موج چرخان تنها زمانی معتبر است که جفت‌شدگی اتم-میدان ضعیف باشد. در واقع، در حضور جفت‌شدگی اتم-میدان قوی [۵]، دیگر نمی‌توان

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

سهم عبارات پادچرخان را نادیده گرفت و به جای مدل جینز-کامینگز باید از مدل رابی استفاده کرد [٦، ٧]. همچنین برای این فرآیند طرح‌های بدون قید و شرط متعددی مورد بحث و بررسی قرار گرفته است [٨]، که بعضاً بخاطر نیاز به اندازه‌گیری حالت بل، هنوز به صورت تجربی محقق نشده‌اند (این اندازه‌گیری یک کار دشوار و چالش‌برانگیز تجربی در آزمایشگاه است) [٩]. بنابراین، طرح‌های بدون نیاز به این نوع اندازه‌گیری برای این پروتکل مورد توجه قرار دارند [١٠-١٢]. در یکی از این طرح‌ها، که مبنای کار ما قرار گرفته است، پروتکل دوربری برای حالت‌های نامعلوم یک کیوبیت و یک میدان، تحت تقریب موج چرخان و به صورت تقریبی و مشروط انجام گرفته است [١٠]. معمولا برای انجام پروتکل دوربری کوانتومی بین دو ناظر دور از هم، به نام‌های آلیس (فرستنده) و باب (گیرنده)، باید شرایطی فراهم شود، از جمله: وجود یک حالت نامعلوم (اتم یا میدان) در آزمایشگاه آلیس، فراهم‌سازی یک کانال کوانتومی غیرمحلی، انجام اندازه‌گیری حالت بل توسط آلیس و نهایتا مخابره نتیجه اندازه‌گیری از طریق یک کانال کلاسیک به باب. در پژوهش حاضر، طرحی برای پروتکل دوربری یک حالت نامعلوم از یک کیوبیت، بدون اندازه‌گیری حالت بل و در حضور جفت‌شدگی قوی (بدون تقریب موج چرخان) پیشنهاد شده است.

مدل دوربری کوانتومی

در این بخش قصد داریم پروتکل دوربری پیشنهادی در مرجع [١٠]، در حضور جفت‌شدگی ضعیف را توسعه می‌دهیم. بدین منظور، جفت‌شدگی را قوی در نظر می‌گیریم و بنابراین از مدل رابی (با در نظر گرفتن عبارات پادچرخان) به جای مدل جینز-کامینگز استفاده می‌کنیم. هامیلتونی رابی برای سامانه‌ای متشکل از یک کیوبیت در برهم‌کنش با یک میدان کوانتیده تک‌مد به صورت زیر بیان می‌گردد [٦] ($\hbar=1$):

$$\hat{H}_R=\nu\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{\omega}{2}\hat{\sigma}_z+g(\hat{a}^\dagger+\hat{a})(\hat{\sigma}_+ +\hat{\sigma}_-) \qquad (١)$$

که پارامترهای ω (ν) و g به ترتیب بسامد گذار اتمی (مد میدان) و ثابت جفت‌شدگی اتم-میدان هستند. همچنین، $\hat{a}$ $(\hat{a}^\dagger)$ عملگر بوزونی نابودی (خلق) میدان و $\hat{\sigma}_+$ $(\hat{\sigma}_-)$ عملگر بالابرنده (پایین‌آورنده) مربوط به کیوبیت هستند. با اعمال عملگر تبدیل یکانی $\hat{\Re}=\exp\left[\frac{g}{\omega+\nu}(\hat{a}\hat{\sigma}_- -\hat{a}^\dagger\hat{\sigma}_+)+\frac{g^2}{2\nu(\omega+\nu)}(\hat{a}^2-\hat{a}^{\dagger 2})\hat{\sigma}_z\right]$ روی هامیلتونی رابی در (١)، هامیلتونی بلاخ-سیگرت مربوط به یک کیوبیت درون کاواک QED تحت جفت‌شدگی اتم-میدان قوی به صورت زیر بدست می‌آید [٦]:

$$\hat{H}_{BS}=\nu\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{\omega_q}{2}\hat{\sigma}_z+g(\hat{a}^\dagger\hat{\sigma}_- +\hat{a}\hat{\sigma}_+)+\mu\hat{\sigma}_z\hat{a}^\dagger\hat{a} \qquad (٢)$$

در اینجا از نمادگذاری‌های زیر استفاده شده است:

$$\omega_q=\omega+\mu \quad ,\mu=g^2/\Sigma \quad ,\Sigma=\omega+\nu$$

نمایش ماتریسی هامیلتونی فوق (با در نظر گرفتن پایه‌های $|e,n\rangle$ و $|g,n+1\rangle$) به صورت زیر بدست می‌آید:

$$\hat{H}_{BS}=\begin{pmatrix}-\frac{\omega_q}{2}-(n+1)\mu+(n+1)\nu & g\sqrt{n+1}\\ g\sqrt{n+1} & \frac{\omega_q}{2}+n(\mu+\nu)\end{pmatrix} \qquad (٣)$$

در نتیجه، عملگر تحول زمانی $\hat{U}=\exp\left(-i\,\hat{H}_{BS}\tau\right)$ متناظر با سامانه مورد نظر با استفاده از رابطه (٣) به صورت زیر حاصل می‌شود:

$$\hat{U}=\begin{pmatrix}y_1(\tau,n) & y_3(\tau,n)\\ y_2(\tau,n) & y_4(\tau,n)\end{pmatrix} \qquad (٤)$$

که درایه‌های آن در زیر آمده است:

$$y_1(\tau,n)=\frac{\lambda+\eta}{2\lambda}\exp\left[\frac{i\tau\beta_+}{2}\right]+\frac{\lambda-\eta}{2\lambda}\exp\left[\frac{i\tau\beta_-}{2}\right]$$
$$y_2(\tau,n)=\frac{g\sqrt{n+1}}{\lambda}\left(\exp\left[\frac{i\tau\beta_-}{2}\right]-\exp\left[\frac{i\tau\beta_+}{2}\right]\right) \qquad (٥)$$
$$y_3(\tau,n)=y_2(\tau,n)$$
$$y_4(\tau,n)=\frac{\lambda-\eta}{2\lambda}\exp\left[\frac{i\tau\beta_+}{2}\right]+\frac{\lambda+\eta}{2\lambda}\exp\left[\frac{i\tau\beta_-}{2}\right]$$

که در آنها: $\mu-(2n+1)\nu\pm\lambda=\beta_\pm$، $\eta=\omega_q+\mu(2n+1)-\nu$ و $\lambda=\sqrt{4g^2(n+1)+\eta^2}$. همچنین $\hat{U}\hat{U}^\dagger=1$، بدین معنا که داریم:

$$|y_1(\tau,n)|^2+|y_3(\tau,n)|^2=|y_2(\tau,n)|^2+|y_4(\tau,n)|^2=1$$
$$y_1(\tau,n)y_2^*(\tau,n)+y_3(\tau,n)y_4^*(\tau,n)=0$$
$$y_2(\tau,n)y_1^*(\tau,n)+y_4(\tau,n)y_3^*(\tau,n)=0$$

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

به کمک عملگر تحول زمانی بدست‌آمده، هر یک از پایه‌های مورد نظر به صورت زیر تحول می‌یابد:

$$|e,n\rangle \to y_3(\tau,n)|g,n+1\rangle + y_4(\tau,n)|e,n\rangle \quad (۶)$$

$$|g,n+1\rangle \to y_1(\tau,n)|g,n+1\rangle + y_2(\tau,n)|e,n\rangle \quad (۷)$$

در اینجا، ضرایب مربوط به هر کدام از روابط فوق شرایط بهنجارش را برآورده می‌کنند ($|y_3(\tau,n)|^2+|y_4(\tau,n)|^2=1$ و $|y_1(\tau,n)|^2+|y_2(\tau,n)|^2=1$). علاوه بر این، به ازای $n=0$، معادله (۵) را می‌توان بر حسب توابع مثلثاتی به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$y_1(\tau,0)=\frac{\Gamma}{\lambda_1}\left[\lambda_1\cos\left(\frac{\lambda_1\tau}{2}\right)+i\,(\omega_q+\mu-\nu)\sin\left(\frac{\lambda_1\tau}{2}\right)\right]$$

$$y_2(\tau,0)=\frac{-2i\,g\,\Gamma}{\lambda_1}\sin\left(\frac{\lambda_1\tau}{2}\right),\quad y_3(\tau,0)=y_2(\tau,0)$$

$$y_4(\tau,0)=\frac{\Gamma}{\lambda_1}\left[\lambda_1\cos\left(\frac{\lambda_1\tau}{2}\right)-i\,(\omega_q+\mu-\nu)\sin\left(\frac{\lambda_1\tau}{2}\right)\right] \quad (۸)$$

در این روابط: $\Gamma=\cos\left(\frac{(\mu-\nu)\tau}{2}\right)+i\sin\left(\frac{(\mu-\nu)\tau}{2}\right)$ و $\lambda_1=\sqrt{4g^2+(\omega_q+\mu-\nu)^2}$. همچنین، به ازای $n=1$ در معادله (۵)، برحسب توابع مثلثاتی داریم:

$$y_1(\tau,1)=\frac{\Lambda}{\lambda_2}\left[\lambda_2\cos\left(\frac{\lambda_2\tau}{2}\right)+i\,(\omega_q+3\mu-\nu)\sin\left(\frac{\lambda_2\tau}{2}\right)\right]$$

$$y_2(\tau,1)=\frac{-2\sqrt{2}i\,g\,\Lambda}{\lambda_2}\sin\left(\frac{\lambda_2\tau}{2}\right),\ y_3(\tau,1)=y_2(\tau,1)$$

$$y_4(\tau,1)=\frac{\Lambda}{\lambda_2}\left[\lambda_2\cos\left(\frac{\lambda_2\tau}{2}\right)-i\,(\omega_q+3\mu-\nu)\sin\left(\frac{\lambda_2\tau}{2}\right)\right] \quad (۹)$$

که در آنها: $\Lambda=\cos\left(\frac{(\mu-3\nu)\tau}{2}\right)+i\sin\left(\frac{(\mu-3\nu)\tau}{2}\right)$ و $\lambda_2=\sqrt{8g^2+(\omega_q+3\mu-\nu)^2}$. اکنون، تمام مقدمات کار برای دوربری حالت نامعلوم یک کیوبیت در حضور جفت‌شدگی قوی فراهم گردیده است. فرض کنید قصد داریم حالت نامعلوم کیوبیت A را انتقال دهیم، که حالت کوانتومی آن به صورت زیر داده شده است:

$$|\phi\rangle_A = c_g|g\rangle_A + c_e|e\rangle_A \quad (۱۰)$$

که در آن $|c_g|^2+|c_e|^2=1$. کیوبیت B (دریافت‌کننده حالت دوربری‌شده) را ابتدا در حالت برانگیخته $|e\rangle_B$ آماده‌سازی می‌کنیم. سپس این کیوبیت به یک کاواک حاوی میدان خلأ $|0\rangle$ فرستاده می‌شود، که با میدان کاواک برهم‌کنش کند. با تنظیم سرعت ورود اتم‌ها به کاواک و طول آن، پس از زمان برهم‌کنش τ_B، کیوبیت B از کاواک خارج می‌شود. حالت مربوط به این سامانه با استفاده از معادلات (۵) و (۶) به صورت زیر بیان می‌شود:

$$|\varphi(\tau_B)\rangle = y_3(\tau_B,0)|g\rangle_B|1\rangle + y_4(\tau_B,0)|e\rangle_B|0\rangle \quad (۱۱)$$

با شرط تشدیدی $\nu=\omega$ و با فرض $\omega_q+\mu-\nu=2g$ می‌توان نتیجه گرفت $\mu=g$، که در این صورت $\omega=g/2$. بنابراین، رابطه فوق را با استفاده از معادله (۸) می‌توان به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$\begin{aligned}|\varphi(\tau_B)\rangle=&\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\sin\left(\frac{g\tau_B}{4}\right)-i\cos\left(\frac{g\tau_B}{4}\right)\right]\\&\times\sin\left(\sqrt{2}g\tau_B\right)|g\rangle_B|1\rangle\\&+\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\cos\left(\frac{g\tau_B}{4}\right)+i\sin\left(\frac{g\tau_B}{4}\right)\right]\\&\times\left[\sqrt{2}\cos\left(\sqrt{2}g\tau_B\right)-i\sin\left(\sqrt{2}g\tau_B\right)\right]|e\rangle_B|0\rangle\end{aligned} \quad (۱۲)$$

اگر سرعت کیوبیت B را طوری تنظیم کنیم که شرط $g\tau_B=\pi/2\sqrt{2}$ نیز برآورده شود، در نهایت داریم:

$$|\varphi\rangle_B=\frac{\gamma}{\sqrt{2}}\left(|g\rangle_B|1\rangle+|e\rangle_B|0\rangle\right) \quad (۱۳)$$

به طوری که $\gamma=\sin\left(\frac{\pi}{8\sqrt{2}}\right)-i\cos\left(\frac{\pi}{8\sqrt{2}}\right)$. در نتیجه، با استفاده از معادلات (۱۰) و (۱۳)، حالت کلی سامانه دوکیوبیتی منجر می‌شود به:

$$|\psi\rangle=\frac{\gamma}{\sqrt{2}}\left(c_g|g\rangle_A+c_e|e\rangle_A\right)\left(|g\rangle_B|1\rangle+|e\rangle_B|0\rangle\right) \quad (۱۴)$$

حال اگر کیوبیت A با میدان تک‌مد مربوط به کاواک برهم‌کنش کند، پس از زمان برهم‌کنش τ_A، و با استفاده از معادلات (۵) تا (۷)، حالت کلی سامانه در رابطه بالا به صورت نهایی زیر تحول می‌یابد:

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$$|\psi(\tau_A)\rangle = \frac{\gamma}{\sqrt{2}} c_g |g\rangle_B \left(y_1(\tau_A,0)|g\rangle_A |1\rangle + y_2(\tau_A,0)|e\rangle_A |0\rangle \right) + \frac{\gamma}{\sqrt{2}} c_g |e\rangle_B |g\rangle_A |0\rangle + \frac{\gamma}{\sqrt{2}} c_e |g\rangle_B \left(y_3(\tau_A,1)|g\rangle_A |2\rangle + y_4(\tau_A,1)|e\rangle_A |1\rangle \right) + \frac{\gamma}{\sqrt{2}} c_e |e\rangle_B \left(y_3(\tau_A,0)|g\rangle_A |1\rangle + y_4(\tau_A,0)|e\rangle_A |0\rangle \right) \quad (۱۵)$$

که هر کدام از ضرایب $y_i(\tau_A,n)$ $[i=1,2,3,4$ و $n=0,1]$ در معادلات (۸) و (۹) تعریف شده‌اند. در نهایت، با در نظر گرفتن شرط تشدید $\nu=\omega$ و با فرض $\omega_q+\mu-\nu=2g$، حال با انجام اندازه‌گیری روی حالت میدان، اگر میدان در حالت $|0\rangle$ یافت شود، حالت فوق به حالت مربوط به زیرسامانه متشکل از کیوبیت‌های A و B و بصورت زیر کاهش می‌یابد:

$$|\psi\rangle' = N \left\{ \frac{\gamma}{2}\left[\sin\left(\frac{g\tau_A}{4}\right) - i\cos\left(\frac{g\tau_A}{4}\right)\right] \times \sin\left(\sqrt{2}g\tau_A\right) c_g |g\rangle_B |e\rangle_A + \frac{\gamma}{\sqrt{2}} c_g |e\rangle_B |g\rangle_A + \frac{\gamma}{2}\left[\cos\left(\frac{g\tau_A}{4}\right) + i\sin\left(\frac{g\tau_A}{4}\right)\right] \times \left[\sqrt{2}\cos\left(\sqrt{2}g\tau_A\right) - i\sin\left(\sqrt{2}g\tau_A\right)\right] c_e |e\rangle_B |e\rangle_A \right\} \quad (۱۶)$$

که در آن N ضریب بهنجارش است. اگر سرعت کیوبیت A را طوری تنظیم کنیم، که شرط $g\tau_A = \pi/2\sqrt{2}$ برقرار شود، رابطه فوق به صورت نهایی زیر بازنویسی می‌شود:

$$|\psi\rangle'' = N \left\{ \frac{\gamma^2}{2}\left[c_g |g\rangle_B + c_e |e\rangle_B \right] |e\rangle_A + \frac{\gamma}{\sqrt{2}} c_g |e\rangle_B |g\rangle_A \right\} \quad (۱۷)$$

حال با اندازه‌گیری روی کیوبیت A، در صورتی که حالت برانگیخته $|e\rangle_A$ به دست آید، کیوبیت B دقیقاً در حالت اولیه کیوبیت A قرار می‌گیرد، یعنی:

$$|\phi\rangle_B = c_g |g\rangle_B + c_e |e\rangle_B \quad (۱۸)$$

بدین‌ترتیب، واضح است که احتمال موفقیت دوربری و وفاداری به ترتیب ۰/۲۵ و ۱ است.

بحث و نتیجه‌گیری

در این پژوهش، ما پروتکل دوربری مطرح‌شده در مرجع [۱۰]، برای انتقال تقریبی و مشروط حالت نامعلوم یک کیوبیت در حضور جفت‌شدگی اتم-میدان ضعیف که با استفاده از مدل جینز-کامینگز محقق شده بود را گسترش دادیم. بدین معنا که در طرح پیشنهادی ما، برای جفت‌شدگی قوی سامانه متشکل از یک کیوبیت در برهم‌کنش با یک میدان کوانتیده تک‌مد از مدل رابی (به جای مدل جینز-کامینگز) استفاده شد. در این راستا با استفاده از هامیلتونی بلاخ-سیگرت (که با اعمال یک عملگر تبدیل یکانی خاص بر روی هامیلتونی رابی به دست آمده است) به عملگر تحول زمانی دست یافتیم. سپس با استفاده از این عملگر، تحول زمانی سامانه را با در نظر گرفتن شرایط اولیه مناسب و مختلف بدست آوردیم. در نهایت با استفاده از اطلاعات موجود، طرحی برای انتقال حالت نامعلوم یک کیوبیت به کیوبیت دوم بدون اندازه‌گیری حالت بل و بدون تقریب موج چرخان پیشنهاد شد، که در نتیجه آن، حالت یک کیوبیت به کیوبیت دوم منتقل شد. این فرآیند دوربری کوانتومی با احتمال موفقیت ۰/۲۵ و حداکثر میزان وفاداری ممکن (یک) انجام گردید.

مرجع‌ها

[1] C. H. Bennett, G. Brassard, C. Crépeau, R. Jozsa, A. Peres and W. K. Wootters; "Teleporting an unknown quantum state via dual classical and Einstein-Podolsky-Rosen channels"; *Phys. Rev. Lett.* **70**, (1993) 1895.
[2] C. Monroe; "Quantum information processing with atoms and photons"; *Nature* **416**, (2002) 238.
[3] C. H. Bennett and D. P. DiVincenzo; "Quantum information and computation"; *Nature* **404**, (2000) 247.
[4] E. T. Jaynes and F. W. Cummings; "Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser"; *Proc. IEEE* **51**, (1963) 89.
[5] P. Forn-Díaz, L. Lamata, E. Rico, J. Kono and E. Solano; "Ultrastrong coupling regimes of light-matter interaction"; *Rev. Mod. Phys.* **91**, (2019) 025005.
[6] F. Beaudoin, J. M. Gambetta and A. Blais; "Dissipation and ultrastrong coupling in circuit QED"; *Phys. Rev. A* **84,** (2011) 043832.
[7] D. Braak; "Integrability of the Rabi model"; *Phys. Rev. Lett.* **107**, (2011) 100401.
[8] S. B. Zheng and G. C. Guo; "Teleportation of an unknown atomic state through the raman atom-cavity-field interaction"; *Phys. Lett. A* **232**, (1997) 171.
[9] R. Pakniat, M. K. Tavassoly and M. Zandi; "Entanglement swapping and teleportation based on cavity QED method using the nonlinear atom-field interaction: cavities with a hybrid of coherent and number states"; *Opt. Commun.* **382**, (2017) 381.
[10] S. B. Zheng; "Scheme for approximate conditional teleportation of an unknown atomic state without the Bell-state measurement"; *Phys. Rev. A* **69**, (2004) 064302.
[11] Z. B. Yang; "Faithful teleportation of an unknown atomic state and a cavity field entangled state without Bell-state measurement"; *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **39**, (2006) 603.
[12] C. Y. Chen; "Approximate and conditional teleportation of an unknown atomic state without the Bell-state measurement with multi-photon interaction"; *Int. J. Theor. Phys.* **45**, (2006) 690.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی اپتیک کوانتومی مواد جاذب کاملا همدوس

باقرزاده، آذر؛ عمو قربان، احسان؛ حیدری، غلامحسین؛

دانشگاه شهرکرد، دانشکده علوم، گروه فیزیک

چکیده

با توجه به اهمیت بسیار فراوان مواد جاذب کاملا همدوس در حوزه‌های مختلف فیزیک و مهندسی در این مقاله به بررسی ویژگی‌های اپتیک کوانتومی این مواد می‌پردازیم. بدین منظور با به کار بردن کوانتش میدان الکترومغناطیسی به روش پدیده شناختی در حضور مواد جاذب به بررسی پدیده ی گسیل خودبه خودی یک اتم دو ترازه ی برانگیخته در مجاورت یک نانو تیغه ی جاذب کاملا همدوس می‌پردازیم. نتایج نشان می دهد که گسیل خودبه خودی اتم مزبور در طول موج‌هایی که تیغه جاذب کاملا همدوس است بزرگ تر از مقدار آن در خلاء است و برخلاف انتظار سرکوب نمی‌شود.

Investigation of quantum optics of coherent perfect absorber materials

Bagherzadeh, Azar; Amooghorban, Ehsan; Haidari, Gholamhossein;

Department of Physics, Science faculty, Shahrekord University

Abstract

Due to the great importance of coherent perfect absorber materials in various fields of physics and engineering, in this article we examine the quantum optical properties of these materials. For this purpose, by applying the quantization of the electromagnetic field by phenomenological method in the presence of absorber materials, we study the phenomenon of spontaneous emission of an excited two-level atom in the vicinity of a coherent perfect absorber nano slab. The results show that the spontaneous emission of this atom at wavelengths where the absorber slab is perfectly coherent is greater than its value in vacuum and it is not suppressed contrary to expectation.

مقدمه

یک جاذب کاملا همدوس (CPA) سامانه‌ای است که جذب کامل نورهای فرودی هم شدت و هم فاز را با کنترل تداخل امواج خروجی فراهم می‌کند [۱]. به طور کلی، پدیده ی CPA از اثر متقابل تداخل و اتلاف ناشی می‌شود و به ازای مقادیر خاصی از اتلاف، الگوهای تداخلی وجود دارند که تابش فرودی را کاملا به دام می‌اندازد. این فرآیند به عنوان وارون زمانی آستانه لیزر نیز توصیف می‌شود [۲]. مفهوم جذب کامل همدوس برای اولین بار در سال ۲۰۱۰ توسط تیمی در دانشگاه ییل به رهبری نظریه پرداز داگلاس استون و فیزیکدان تجربی هوی کائو معرفی شد [۳]. در سال ۲۰۱۹ تیمی از دانشگاه‌های وین و نایس نخستین آزمایش CPA چند کانالی را در یک محیط پراکنده نامنظم ارائه کردند. در این ساختار جذب بیش از ۹۹,۷۸٪ شدت ورودی به دست آمد [۴]. همچنین نخستین نمونه یک CPA آکوستیکی با استفاده از مشددهای لایه‌ای پوششی ساخته شد [۵]. CPA ها در ساختارهای مدهای هدایت شونده، مانند فیبرهای نوری یا موجبرهای پلاسمونی نیز مورد استفاده قرار می‌گیرند و می‌توانند به عنوان اجزائی در مدارهای نوری یکپارچه برای پردازش سیگنال و محاسبات عمل کنند. در یک پیاده‌سازی، نانو آنتن‌های جاذب تشدید کننده در داخل یا نزدیک موجبر قرار می‌گیرند [۶]. اثرات جذب همدوس برای تولید جریان نوری در سامانه‌های فوتوالکتروشیمیایی نیز مفید است. این اثر در یک سلول خورشیدی حساس به رنگدانه نشان داده شده است [۷]. این ساختارها در حوزه کلاسیکی توسط محققان زیادی بررسی شده‌اند ولی به ندرت در حوزه‌ی کوانتومی مطالعه شده‌اند. در این پژوهش قصد داریم به بررسی گسیل خودبه خودی اتم‌های دو ترازه در مجاورت مواد جاذب کاملا همدوس بپردازیم. زیرا پدیده‌ی گسیل خودبه‌خودی یک پدیده ی کاملا کوانتومی است. بدین منظور ابتدا کوانتش میدان الکترومغناطیسی را به روش پدیده‌شناختی در حضور محیط همسانگرد و جاذب بررسی می‌کنیم. سپس گسیل خودبه خودی یک اتم دو ترازه ی برانگیخته که در فاصله‌ی مشخصی از یک نانو تیغه‌ی CPA است، محاسبه می‌کنیم.

کوانتش میدان الکترومغناطیسی در حضور ماده‌ی جاذب

با استفاده از رهیافت پدیده شناختی در کوانتش میدان الکترومغناطیسی در محیط‌های جاذب، عملگر میدان الکتریکی به صورت زیر نوشته می شود [۸]

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},\omega)=i\,\frac{\omega^2}{c^2}\sqrt{\frac{\hbar\varepsilon_0}{\pi}} \times\int d^3\mathbf{r}'\sqrt{\mathrm{Im}\left[\varepsilon(\mathbf{r}',\omega)\right]}\,\overline{\overline{\mathbf{G}}}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega)\cdot\hat{\mathbf{f}}(\mathbf{r}',\omega), \quad (۱)$$

در اینجا، مولفه‌های عملگر بوزونی میدان -ماده $\hat{\mathbf{f}}(\mathbf{r},\omega)$ در روابط جابه‌جایی زیر صدق می‌کنند:

$$\left[f_i(\mathbf{r},\omega),f_j^{\dagger}(\mathbf{r}',\omega')\right]=\delta_{ij}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\delta(\omega-\omega'), \quad (۲)$$

$$\left[f_i(\mathbf{r},\omega),f_j(\mathbf{r}',\omega')\right]=\left[f_i^{\dagger}(\mathbf{r},\omega),f_j^{\dagger}(\mathbf{r}',\omega')\right]=0. \quad (۳)$$

تانسور گرین الکترومغناطیسی $\overline{\overline{\mathbf{G}}}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega)$ معادله‌ی هلمهولتز زیر را برآورده می‌کند:

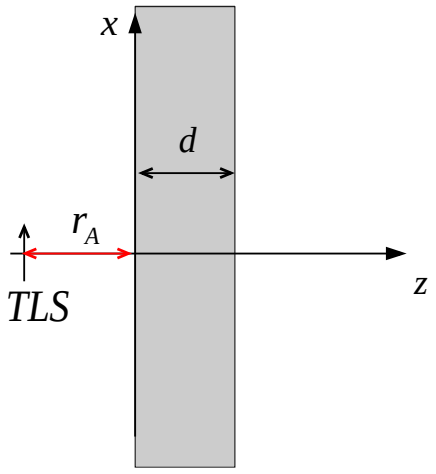
$$\left[\frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon(\mathbf{r},\omega)-\nabla\times\nabla\times\right]\overline{\overline{\mathbf{G}}}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega)=-\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \quad (۴)$$

بنابراین هامیلتونی میدان الکترومغناطیسی و ماده براساس عملگرهای $\hat{\mathbf{f}}(\mathbf{r},\omega)$ و $\hat{\mathbf{f}}^{\dagger}(\mathbf{r},\omega)$ به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\mathbf{H}=\int d^3\mathbf{r}\int_0^{\infty}d\omega\hbar\omega\hat{\mathbf{f}}^{\dagger}(\mathbf{r},\omega)\cdot\hat{\mathbf{f}}(\mathbf{r},\omega). \quad (۵)$$

دینامیک سامانه

یک اتم دو ترازه‌ی برانگیخته با بسامد گذار ω_A که در مکان $\mathbf{r}_A$ از وجه سمت چپ یک تیغه‌ی جاذب کاملا همدوس با ضخامت d است، درنظر می‌گیریم (شکل ۱). تاکنون برای تحقق تجربی مواد جاذب کاملا همدوس سه دسته مواد برپایه‌ی فیلم‌های نازک، متامواد و ساختارهای موجبری پیشنهاد شده است. در این پژوهش برپایه‌ی فیلم‌های نازک از نانو تیغه‌های سیلیسیومی آلاییده به عنوان مواد جاذب کاملا همدوس استفاده می‌کنیم.



شکل ۱: طرح‌واره‌ای از سامانه مورد مطالعه: یک اتم دوترازی در مجاورت یک نانو تیغه‌ی جاذب کاملا همدوس است.

مطابق مرجع[۹]، گذردهی الکتریکی این مواد پاشنده را می‌توان توسط مدل درود زیر توصیف کرد:

$$\varepsilon=\varepsilon_1+i\,\varepsilon_2=\varepsilon_{\infty}-\frac{\omega_p^2}{\omega(\omega+i\Gamma)}, \quad (۶)$$

که در آن

$$\varepsilon_1=\varepsilon_{\infty}-\frac{\omega_p^2\tau^2}{1+\omega^2\tau^2}, \quad (۷)$$

$$\varepsilon_2=\frac{\omega_p^2\tau^2}{\omega(1+\omega^2\tau^2)}. \quad (۸)$$

دراینجا، ε_{∞} ثابت دی الکتریک ایستا، τ ضریب واهلش و ω_p فرکانس پلاسما است.

با به کاربردن تقریب امواج چرخان و تقریب دو قطبی الکتریکی، هامیلتونی کل سامانه متشکل از میدان الکترومغناطیسی، ماده‌ی جاذب و برهمکنش بین آن‌ها به صورت زیر بیان می‌شود[۸و۱۰]

$$H=\int d^3\mathbf{r}\int_0^{\infty}d\omega\hbar\omega\hat{\mathbf{f}}^{\dagger}(\mathbf{r},\omega)\cdot\hat{\mathbf{f}}(\mathbf{r},\omega) +\hbar\omega_A\sigma^{\dagger}\sigma-\left[\sigma^{\dagger}\mathbf{E}^{(+)}(\mathbf{r}_A,\omega)\cdot\boldsymbol{\mu}+H.c.\right]. \quad (۹)$$

که در آن $\sigma=|l\rangle\langle u|$ و $\sigma^{\dagger}=|u\rangle\langle l|$ به ترتیب عملگرهای پایین آورنده و بالابرنده ی پائولی و $|l\rangle$ و $|u\rangle$ به ترتیب حالت‌های تراز پایه و برانگیخته‌ی اتم دو ترازی هستند. همچنین $\boldsymbol{\mu}$ گشتاور دو قطبی اتم است. با فرض اینکه که اتم در ابتدا در حالت برانگیخته و میدان در حالت خلا است، تابع موج سامانه در زمان t به صورت زیر نوشته می شود:

$$|\psi(t)\rangle=C_u(t)e^{-i(\omega_A/2)t}|u\rangle|\{0\}\rangle +\int d^3\mathbf{r}\int_0^{\infty}d\omega C_{li}(\mathbf{r},\omega,t)e^{-i(\omega-\omega_A/2)t}|l\rangle|\{1_i(\mathbf{r},\omega)\}\rangle. \quad (۱۰)$$

ضرایب $C_u(t)$ و $C_{li}(\mathbf{r},\omega,t)$ به ترتیب دامنه های احتمال یافتن سامانه درحالت اولیه $|u\rangle|\{0\}\rangle$ و حالت نهایی $|l\rangle|1_i(\mathbf{r},\omega)\rangle$ هستند. در ادامه با جایگذاری رابطه‌ی بالا در معادله‌ی شرودینگر و به‌کاربردن تقریب مارکوف، آهنگ گسیل خودبه خودی و جابه جایی لمب اتم دوترازه برانگیخته به شکل زیر نوشته می‌شوند:

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$$\gamma = \frac{6\pi c\gamma_0}{\omega_A}\hat{\boldsymbol{\mu}}\cdot \mathrm{Im}\left[\overline{\overline{\mathbf{G}}}\left(\mathbf{r}_A,\mathbf{r}_A,\omega_A\right)\right]\cdot\hat{\boldsymbol{\mu}},$$
$$\Omega = -\frac{6\pi c\gamma_0}{\omega_A}\hat{\boldsymbol{\mu}}\cdot \mathrm{Re}\left[\overline{\overline{\mathbf{G}}}\left(\mathbf{r}_A,\mathbf{r}_A,\omega_A\right)\right]\cdot\hat{\boldsymbol{\mu}}. \quad (۱۱)$$

که در آن P مقدار اصلی کوشی، $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ بردار یکه متناظر با گشتاور دوقطبی اتم، و $\gamma_0 = \frac{2|\mu|^2\omega_0^3}{3c^3\hbar}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}$ آهنگ گسیل خودبه‌خودی اتم مزبور در خلاء است.

تانسور گرین الکترومغناطیسی سامانه

تانسور گرین الکترومغناطیسی متناظر با یک ساختار تخت برای وضعیتی که نقاط میدان و چشمه در مکان $\mathbf{r}_A=(0,0,-|z_1|)^t$ قرار دارند، به صورت زیر بیان می‌شود [۱۱]:

$$\overline{\overline{\mathbf{G}}}\left(\mathbf{r}_A,\mathbf{r}_A\right) = \int\frac{d^2\kappa}{(2\pi)^2}\overline{\overline{\mathbf{G}}}^{single}\left(\boldsymbol{\kappa},z\right), \quad (۱۲)$$

که در آن $\boldsymbol{\kappa}=\left(k_x,k_y\right)^t$ و

$$\overline{\overline{\mathbf{G}}}^{single}\left(\boldsymbol{\kappa},z\right) = \frac{i}{2k_{z,vac}}\sum_{i=s,p}\Big[\mathbf{a}_i^+\left(k_0\right)\otimes\mathbf{a}_i^+\left(k_0\right) + e^{2ik_{z,vac}|z_1|}\,r_i\,\mathbf{a}_i^+\left(k_0\right)\otimes\mathbf{a}_i^-\left(k_0\right)\Big]. \quad (۱۳)$$

است. در این جا، $k_{z,vac}$ مولفه‌ی zام بردار موج در خلا است که به صورت $k_{z,vac}=\sqrt{k_0^2-\kappa^2}$ تعریف می‌شود که در آن $k_0=\omega_0/c$ و κ مولفه مماسی بردار موج است. همچنین، بردارهای قطبش $\mathbf{a}_{s,p}^+$ و $\mathbf{a}_{s,p}^-$ به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\mathbf{a}_s^-\left(k_0\right)=\mathbf{a}_s^+\left(k_0\right)=\frac{1}{\kappa}\begin{pmatrix}k_y\\-k_x\\0\end{pmatrix},$$
$$\mathbf{a}_p^+\left(k_0\right)=\frac{1}{\kappa k_0}\begin{pmatrix}-k_xk_{z,vac}\\-k_yk_{z,vac}\\\kappa^2\end{pmatrix}. \quad (۱۴)$$

در اینجا، $r_{s(p)}=R_{s(p)}\frac{1-e^{2ik_zd}}{1-R_{s(p)}^2e^{2ik_zd}}$ ضرایب بازتاب از تیغه هستند که در آن $k_z=\sqrt{k_0^2\varepsilon-\kappa^2}$، و $R_s=\frac{k_{z,vac}-k_z}{k_{z,vac}+k_z}$ و $R_p=\frac{k_{z,vac}\varepsilon-k_z}{k_{z,vac}\varepsilon+k_z}$ ضرایب بازتاب فرنل برای قطبش های s و p هستند.

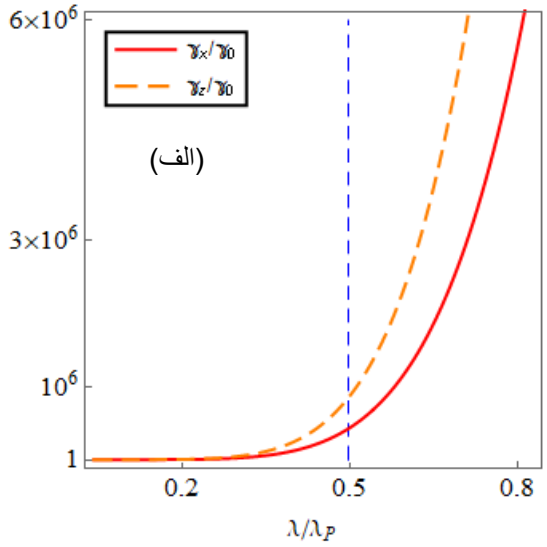
تجزیه و تحلیل

با در نظر گرفتن گشتاور دوقطبی اتم در راستای x و z، و انجام محاسبات طولانی مولفه‌های $\overline{\overline{\mathbf{G}}}_{xx}$ و $\overline{\overline{\mathbf{G}}}_{zz}$ تانسور گرین سامانه به صورت زیر به دست می‌آیند

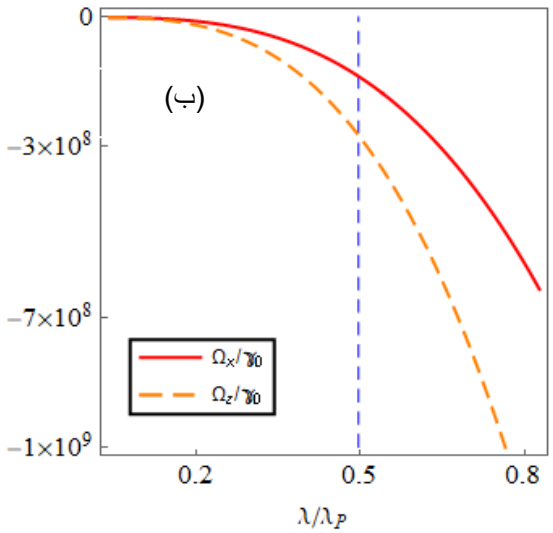
$$\overline{\overline{\mathbf{G}}}_{xx}\left(\mathbf{r}_A,\mathbf{r}_A\right)=\int\frac{d\kappa}{2\pi}\frac{i\kappa}{2k_{z,vac}} \times\left[\frac{k_0^2+k_{z,vac}^2}{2k_0^2}+e^{2ik_{z,vac}|z_1|}\frac{1}{2}\left(r_s-r_p\frac{k_{z,vac}^2}{k_0^2}\right)\right], \quad (۱۵)$$

$$\overline{\overline{\mathbf{G}}}_{zz}\left(\mathbf{r}_A,\mathbf{r}_A\right)=\int\frac{i\kappa d\kappa}{4\pi k_{z,vac}}\frac{\kappa^2}{k_0^2}\left(1+r_pe^{2ik_{z,vac}|z_1|}\right). \quad (۱۶)$$

با جایگذاری روابط بالا در رابطه‌های (۱۱) و به کاربردن گذردهی الکتریکی (۶)، در شکل ۲ نمودار آهنگ گسیل خودبه‌خودی و جابه‌جایی لمب اتم برانگیخته مورد مطالعه بر حسب طول موج رسم شده است. در اینجا، اتم برانگیخته در فاصله‌ی $z_1=10nm$ از تیغه با پارامترهای مادی $\Gamma=16.5\times10^{12}Hz$ و $\varepsilon_\infty=11.7$، $\omega_p=1.67\times10^{13}Hz$ است.



این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل ۲: نمودار (الف) آهنگ گسیل خودبه‌خودی و (ب) جابه جایی لمب اتم دوترازی در مجاورت تیغه CPA بر حسب طول موج بدون بعد λ/λ_p. نمودار توپر قرمز رنگ (خطچین نارنجی رنگ) بیانگر وضعیتی است که گشتاور اتم در راستای محور x (z) است. در اینجا، γ_0 آهنگ گسیل خودبه‌خودی اتم مزبور در خلاء است.

نشان داده می‌شود که تیغه مزبور با ضخامت $150nm$ به ازای طول موج $0.6\times10^2\,\mu m$ ویژگی یک تیغه‌ی CPA را نشان می‌دهد [۹]. این طول موج با خط چین آبی رنگ در شکل نشان داده شده است. مشاهده می‌شود که آهنگ‌های گسیل خودبه‌خودی با افزایش طول موج به شدت افزایش می‌یابد. این روند افزایشی برای وضعیتی که گشتاور اتم در راستای عمود بر تیغه است، بیشتر است. به‌علاوه، در طول موج‌های نزدیک به پدیده‌ی CPA این پارامترها بسیار بزرگتر از مقدار خلاء است. در حالی که از مواد با ضرایب جذب بالا انتظار داشتیم که آهنگ گسیل خودبخودی سرکوب شود [۱۲]. این نتیجه از ویژگی های مواد CPA ناشی می‌شود. به طور مشابه، نتایج یکسانی را برای جابه‌جایی لمب مشاهده می‌کنیم.

نتایج

در این مقاله به بررسی ویژگی‌های اپتیک کوانتومی مواد جاذب کاملا همدوس پرداخته شد. بدین منظور به مطالعه پدیده‌ی گسیل خودبه خودی و جابه جایی لمب یک اتم دو ترازه‌ی برانگیخته که در مجاورت یک نانو تیغه‌ی جاذب کاملا همدوس است، پرداختیم. نتایج نشان می‌دهد که این پارامترها در طول موج‌هایی که تیغه جاذب کاملا همدوس است بسیار بزرگتر از مقدارشان در خلاء است. به صورتی‌که با افزایش طول موج این پارامترها بیشتر افزایش می‌یابند.

مراجع

[1] D. G. Baranov, A. Krasnok, T. Shegai, A. Alu, and Y. D. Chong, Nat. Rev. Mater. **2**, 17064 (2017).
[2] Y. D. Chong, L. Ge, H. Cao, and A. D. Stone, Phys. Rev. Lett. **105**, 053901 (2010).
[3] S. Longhi, Physics. **3**, 61 (2010).
[4] K. Pichler, M. Kühmayer, J. Böhm, A. Brandstötter, P. Ambichl, U. Kuhl, and S. Rotter, Nature **567**, 351 (2019).
[5] C. Meng, X. Zhang, S. T. Tang, M. Yang, and Z. Yang, Sci. Rep. **7**, 43574 (2017).
[6] R. Bruck, and O. L. Muskens, *Opt. Express* **21**, 27652 (2013).
[7] S. F. Liew, S. M. Popoff, S. W. Sheehan, A. Goetschy, C. A. Schmuttenmaer, A. D. Stone, and H. Cao. *ACS Photonics* **3**, 449 (2016).
[8] H. T. Dung, L. köll, and D. G. Welsch, Phys. Rev. A, **62**, 053804 (2000).
[9] J. Yuan, J. Luo, M. Zhang, M. Pu, X. Li, Z. Zhao, and X. Luo, IEEE Photonics J. **10**, 5901010 (2018).
[10] M. M. Behbahani, E. Amooghorban, and A. Mahdifar, Phys. Rev. A **94**, 013854 (2016).
[11] S. A. Biehs, and G. S. Agarwal, Phys. Rev. A **96**, 022308 (2017).
[12] S. M. Barnett, B. Huttner, and R. Loudon, Phys. Rev. Lett. **68**, 3698 (1992).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

شبیه سازی یک نوسانگر تمام فیبری به منظور بکارگیری در سیستم (MOPA)

عارف شیرمهدیه ، ناصر سیاهوشی *

گروه فوتونیک، دانشکده و پژوهشکده شهید فخری زاده (علوم پایه) ، دانشگاه جامع امام حسین(ع)، تهران، ایران
n.siahvashi.r@gmail.com

چکیده

یکی از چالش‌های اساسی در فناوری لیزر، بالا بردن توان انواع لیزرها با توجه به کاربرد آن‌ها در صنایع مختلف است. سیستم نوسانگر اصلی-تقویت کننده توان یکی از مهمترین روش‌ها در دستیابی به این مهم است. در این پژوهش، یک نوسانگر تمام فیبری با تمرکز بر روی پیدا کردن بیشترین توان خروجی از بین سه روش دمش پیشرو، پسرو، و دو جهتی و با در نظر گرفتن تلفات پراکندگی سیگنال و بدون در نظر گرفتن آن در طول بهینه به منظور استفاده در سیستم MOPA طراحی و شبیه سازی شده است. شبیه‌سازی صورت گرفته با استفاده از نرم افزار متلب و با الگوریتم رانگ کوتا و تکنیک شوتینگ انجام شده است.

واژه های کلیدی: *لیزرهای پرتوان، نوسانگر تمام فیبری، سیستم‌های MOPA، توان سیگنال و پمپ*

Simulation of an all-fiber oscillator for using in the MOPA system

Aref Shirmahdieh, Naser Siahvashi*

Shahid Fakhrizadeh School and Research Institute, Imam Hossein University, Tehran, Iran

Abstract

One of the main challenges in laser technology is to increasing the power of different types of lasers due to their application in various industries. The master oscillator-power amplifier system is one of the most important methods in achieving this goal. In this study, an all-fiber oscillator with a focus on finding the maximum output power between the three methods of blowing forward, backward, and bidirectional, taking into account the signal scattering losses and considering the optimal length for use in The MOPA system is designed and simulated.The simulation was performed using MATLAB software with Rong Kota algorithm and shooting method.
***Keywords**: High-power lasers; All-fiber oscillator; MOPA systems; Signal and pump power*
PACS 42.

مقدمه

لیزرهای فیبری به دلیل داشتن ویژگی‌هایی از قبیل بازده بالای لیزری، سبک بودن و حجم‌کم ، کیفیت باریکه‌ی بالا، قابلیت حصول توان بالا و نیز انعطاف‌پذیری گزینه مناسبی برای استفاده در حوزه‌های مختلف هستند[۱-۳]

توان لیزرهای فیبری از مقیاس میلی‌وات تا کیلووات گسترده است. یکی از متداول‌ترین و کاربردی‌ترین پیکربندی‌های مورداستفاده جهت دستیابی به توان‌های مرتبه بالا سیستم نوسانگر اصلی - تقویت‌کننده (MOPA) توان است زیرا این سیستم‌ها توانایی غلبه بر محدودیت توانی در لیزرهای یکپارچه را دارا هستند. [٤-٥]

اصطلاح نوسانگر اصلی - تقویت‌کننده توان (MOPA) به پیکربندی متشکل از یک نوسانگر اصلی (لیزر بذر) و یک یا چندطبقه تقویت‌کننده نوری برای تقویت توان خروجی اطلاق می‌شود[٦]. نوسانگر اصلی که همان کاواک لیزری است، باریکه همدوس با توان و پهنای فرکانسی پایین و کیفیت باریکه مطلوب را

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تولید می‌کند. بخش تقویت‌کننده متشکل از محیط بهره‌ای است که وظیفه بالابردن توان باریکه را دارد[۷]. از حیث اهمیت تولید یک باریکه لیزری با ویژگی‌های مطلوب به‌منظور به‌کارگیری در طبقات تقویت‌کننده، در این مقاله طراحی و شبیه‌سازی یک نوسانگر تمام فیبری با آلاییدگی ایتربیوم انجام شده است. شبیه‌سازی بر اساس حل معادلات توانی حاکم بر فیبر آلاییده از روش عددی رانگ_کوتا مرتبه چهارم و تکنیک شوتینگ صورت‌گرفته است. این بررسی برای سه حالت مختلف دمش پیشرو، دمش پسرو و دمش از دو جهت بررسی شده است که در ادامه به آن پرداخته خواهد شد.

تئوری

معادلات حاکم بر فیبر آلاییده به‌صورت کلی در روابط (۱) و (۲) که به ترتیب توان پمپ و توان سیگنال را نشان می‌دهند، ارائه شده است. کمیت‌های P_p و P_s به ترتیب نشان دهنده‌ی توان پمپ و توان سیگنال می باشند. همچنین نماد $\pm$ انتشار رو به جلو و رو به عقب را نشان می‌دهد. Γp (Γs) ضریب همپوشانی پمپ (سیگنال) را نشان می‌دهند. $\sigma_{ap}(\sigma_{as})$ و $(\sigma_{es})\sigma_{ep}$ به ترتیب سطح مقطع جذب و انتشار پمپ (سیگنال) را تعیین می کنند. α_p و α_s نشان دهنده تلفات پراکندگی در فرکانس پمپ و سیگنال است[۸].

$$\pm\frac{dP_p^{\pm}(z)}{dz}=\Gamma_p[(\sigma_{ap}+\sigma_{ep})N_2(z)-\sigma_{ap}N\,]P_p^{\pm}(z)-\alpha_p P_p^{\pm}(z) \quad (۱)$$

$$\pm\frac{dP_s^{\pm}(z)}{dz}=\Gamma_s[(\sigma_{as}+\sigma_{es})N_2(z)-\sigma_{as}N\,]P_s^{+}(z)-\alpha_s P_s^{+}(z) \quad (۲)$$

N_2 چگالی جمعیت ترازهای برانگیخته می‌باشد و از طریق رابطه‌ی(۳) محاسبه می‌شود. در این رابطه ν_s (ν_p) به ترتیب فرکانس سیگنال (پمپ)، A سطح مقطع فیبرنوری می‌باشد و طول عمر خود به خودی فوتون‌ها توسط τ نشان داده می‌شود. همچنین h ، ثابت پلانک و c ، سرعت نور در خلا می‌باشد. در معادله‌ی (٤) چگالی جمعیت کل یون‌های آلاییده شده در فیبر توسط N نشان داده می شود و مطابق رابطه (٤) از مجموع N_1 ، چگالی جمعیت تراز پایه و N_2 چگالی جمعیت تراز برانگیخته تشکیل شده است. در این روابط غلظت یون در واحد حجم (N) ثابت و مستقل از موقعیت z در امتداد فیبر نوری می باشد.

$$\frac{N_2(z)}{N}=\frac{\frac{\Gamma_p\sigma_{ap}[P_p^{+}(z)+P_p^{-}(z)]}{h\nu_p A}+\frac{\Gamma_s\sigma_{as}[P_s^{+}(z)]}{h\nu_s A}}{\frac{\Gamma_p(\sigma_{ap}+\sigma_{ep})[P_p^{+}(z)+P_p^{-}(z)]}{h\nu_p A}+\frac{1}{\tau}+\frac{\Gamma_s(\sigma_{as}+\sigma_{es})[P_s^{+}(z)]}{h\nu_s A}} \quad (۳)$$

$$N=N_1(z)+N_2(z) \quad (٤)$$

یکی از شیوه‌های متعارف برای حل این نوع معادلات، روش رانگ_کوتا مرتبه‌ی چهارم می‌باشد که در بسیاری از گزارشات پژوهشی بدان اشاره شده است. روند محاسبات به این‌گونه است که با داشتن مقادیر اولیه‌ی توان‌های دمش و سیگنال در ابتدای فیبر، مقادیر نهایی توان‌ها در نقطه‌ی پایانی فیبر به دست می‌آید. ازآنجایی‌که مقادیر اولیه‌ی توان سیگنال‌های رفت و بازگشتی مجهول هستند، از تکنیک شوتینگ جهت برآورده شدن شرایط تعیین مقادیر اولیه استفاده شده است. به دلیل حضور توری‌های براگ فیبری (آیینه‌های لیزری)، شرایط مرزی بر این سیستم حاکم است. این شرایط عبارت‌اند از:

$$P_s^{+}(0)=R_1P_s^{-}(0) \quad (۵)$$

$$P_s^{-}(L)=R_2P_s^{+}(L) \quad (٦)$$

با حل عددی معادلات فوق، نوسانگر تمام فیبری شبیه سازی شده و رفتار توان دمش و توان سیگنال در طول فیبر برای سه حالت دمش بررسی شده است. نهایتاً خروجی سیستم بر حسب طول فیبر در هر سه حالت دمش اشاره شده مورد بررسی قرار گرفته است.

شبیه سازی

در ابتدا یک سیستم تشدیدگر آلاییده به ایتربیم در بستر سیلیکا را در دو حالت مختلف، با درنظر گرفتن تلفات پراکندگی سیگنال $(\alpha_s \neq 0)$ و بدون در نظر گرفتن تلفات پراکندگی $(\alpha_s = 0)$ و برای هر سه حالت دمش، بررسی نموده و سپس نتایج به دست آمده با هم مقایسه شده‌اند. پارامترهای به کار رفته در تمامی محاسبات در جدول (۱) آورده شده است.

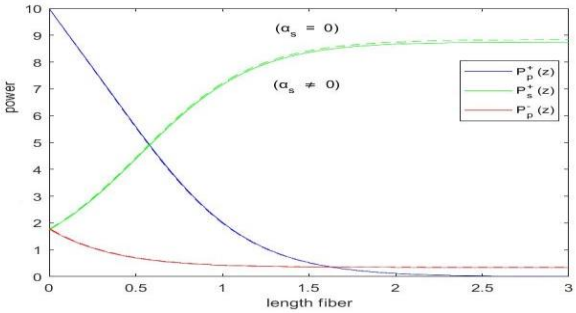
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

در شبیه‌سازی‌های صورت گرفته، توان دمش ۱۰ وات در نظر گرفته شده است. شکل‌های (۱) تا (۳)، نمودار تغییرات توان‌های دمش در طول فیبر و در هر سه روش دمش برای فیبر نوری آلاییده به یون‌های Yb^{3+} را نشان می‌دهند. در تزریق پیشرو که در آن $P_p^-(z)=0$ است، منبع دمش با طول‌موج λ_p در مکان $z=0$ قرار گرفته و توان دمش پس از عبور از بازتابنده‌ی R_1 با ضریب بازتاب ۰.۹۸ برای طول موج سیگنال به یون‌های آلاییده‌ی فیبر می‌رسد.[۵]

جدول ۱ : پارامتر های بکار رفته در معادلات نرخ لیزر

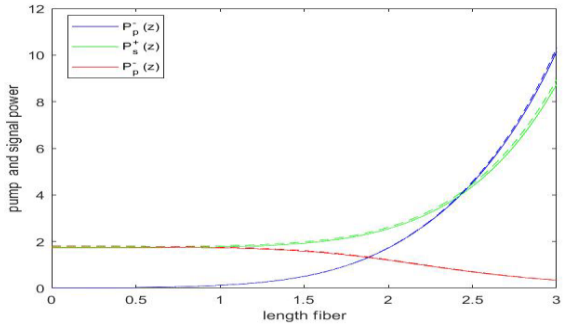
کمیت	مقدار	کمیت	مقدار
λ_p	۹۳۰ nm	α_p	۰.۰۰۳ m^{-1}
λ_s	۱۰۹۰ nm	α_s	۰.۰۰۵ m^{-1}
τ	۰.۸۴ ms	Γ_p	۰.۲
σ_{ap}	۸×۱۰^{-۲۵} m^{-2}	Γ_s	۰.۸۲
σ_{ep}	۳×۱۰^{-۲۶} m^{-2}	L	۳ m
σ_{es}	۲×۱۰^{-۲۵} m^{-2}	P_p	۱۰ W
σ_{as}	۱.۴×۱۰^{-۲۷} m^{-2}	P_s	۰.۱ W
A	۵×۱۰^{-۱۱} m^{-2}	h	۶.۶۳×۱۰^{-۳۴} j.s
N	$۱.۹\times ۱۰^{+۲۵}$ m^{-3}	c	$۳\times ۱۰^{+۸}$ ms^{-1}

شکل(۱) تغییرات توان پمپ و سیگنال در دو حالت حضور و عدم حضور تلفات پراکندگی سیگنال را برای حالت دمش پیشرو نشان می‌دهد.



شکل ۱ : تغییرات توان پمپ و سیگنال در طول فیبر در تزریق پیشرو با (بدون) درنظر گرفتن تلفات پراکندگی سیگنال

همان‌گونه که در شکل (۱) نشان داده شده است توان پمپ با تقویت سیگنال رفته رفته کاهش می‌یابد و از طرف دیگر توان سیگنال به آرامی در ۲ متر اول رشد کرده و پس از رسیدن به یک مقدار بیشینه، بقیه‌ی طول فیبر را با همان توان، طی می‌کند. همان‌طور که انتظار می‌رود، مقدار توان سیگنال در حضور تلفات پراکندگی سیگنال لیزر، کمتر از مقدار آن بدون حضور تلفات است. حال اگر همانند آنچه در شکل(۲) نشان داده شده، منبع دمش در انتهای فیبر در مکان $z=L$ قرار داشته باشد و نور دمش از میان آیینه‌ی R_2 با ضریب بازتاب ۰/۰٤ وارد فیبر شود، در حالت دمش پسرو بوده که در این حالت مقدار $P_p^+(z)=0$ است.



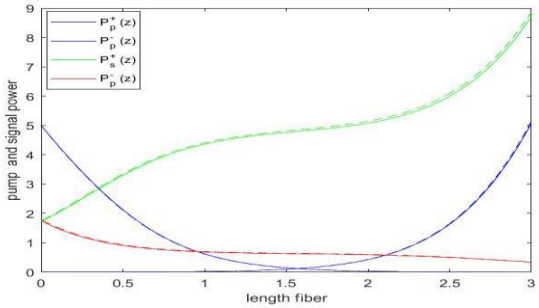
شـــکل ۲ : تغییرات توان‌های دمش و سیگنال در طول فیبر در تزریق پســـرو با (بدون) درنظر گرفتن تلفات پراکندگی سیگنال

در حالت پسرو همانطور که در شکل(۲) نشان داده شده است توان دمش و سیگنال در خلاف جهت یکدیگر قرار داشته و توان دمش در ابتدای فیبر صفر و در قسمت انتهای فیبر به مقدار بیشینه رسیده و همین امر موجب تغییر در چگالی توان سیگنال نسبت به حالت دمش پیشرو نیز شده است، بدین صورت که تغییرات توان سیگنال در ابتدای فیبر صفر و سپس رفته رفته افزایش می‌یابد.

توجه در شکل‌های (۱) و (۲) نشان می‌دهد که، توزیع توان دمش در تزریق پسرو، تقریبا قرینه‌ی تغییرات توان دمش در تزریق پیشرو است. اختلاف اندک مشاهده شده، ناشی از لحاظ کردن اثر تلفات پراکندگی سیگنال می‌باشد. اما توزیع توان سیگنال با تغییر جهت انتشار، جهت دمش و طول فیبر تغییر می‌یابد. در ابتدای فیبر که به منبع دمش نزدیک است، توان سیگنال رشد سریعتری نسبت به نقاط بعدی داشته و به مرور این روند رشد کند می‌شود. درحالی‌که در دمش پسرو، رشد توان سیگنال در انتهای فیبر سریع‌تر است و در چند متر اول فیبر، تقویت چشمگیری دیده نمی‌شود و سیگنال بیشتر طول فیبر را با توان کم طی می‌کند. بنابراین، در دمش پسرو طول مؤثری که فوتون‌ها تجربه می کنند، بیش‌تر از حالت تزریق پیشرو است. درنتیجه، میزان تلفات در دمش پیشرو افزایش یافته و بازده و توان خروجی، کاهش می‌یابد. در انتشار دوجهتی، توان‌های $P_p^+(0)$ و $P_p^-(L)$ به ترتیب در نقاط ابتدایی و انتهایی فیبر تزریق می‌شوند.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مقادیر اولیه‌ی این توان‌ها می‌توانند مساوی و یا مخالف یکدیگر باشند.



شکل ۳ : تغییرات توان‌های دمش و سیگنال در طول فیبر در تزریق دوجهتی با (بدون) درنظر گرفتن تلفات پراکندگی سیگنال

اگر مقادیر توان‌های تزریق شده در دو سوی فیبر برابر باشند، همانند شکل(۳) نمودار تغییرات توان‌های دمش $P_p^{\pm}(z)$ نسبت به نقطه‌ی میانی فیبر $(Z = L/2)$ متقارن خواهند بود همچنین رفتار توان سیگنال در این حالت تقریبا یکنواخت است.

نتیجه گیری

در این پژوهش، یک نوسانگر تمام فیبری با تمرکز بر روی پیدا کردن بیشترین توان خروجی از بین سه روش دمش پیشرو، پسرو، و دو جهتی و با در نظر گرفتن تلفات پراکندگی سیگنال و بدون در نظر گرفتن آن در طول بهینه به منظور استفاده در سیستم MOPA طراحی و شبیه سازی شد. برای این منظور تغییرات توان دمش و سیگنال برحسب طول فیبر برای هر سه حالت بررسی شده است. [۸] نتایج بدست آمده نشان می‌دهد، در طول بهینه فیبر، به ازای توان یکسان پمپ، مقدار توان خروجی در حالت انتشار پسرو بیشینه و در حالت تزریق پیشرو، دارای کمترین مقدار است. درنتیجه، انتظار می رود که مقدار توان خروجی سیستم در انتشار ناهمسو نسبت به سایر حالت ها بیشینه باشد.

مرجع‌ها

[1] H. Kaushal and G. Kaddoum, “Applications of Lasers for Tactical Military Operations,” *IEEE Access*, vol. 5, pp. 20736–20753, 2017, doi: 10.1109/ACCESS.2017.2755678.
[2] J. Hecht, “A short history of laser development Short history of laser development of Photo-Optical Instrumentation,” *Opt. Eng.*, vol. 49, no. 49, pp. 99–122, 2010, doi: 10.1117/1.3483597.
[3] A. Liu, “Novel SBS suppression scheme for high-power fiber amplifiers,” *Fiber Lasers III Technol. Syst. Appl.*, vol. 6102, p. 61021R, 2006, doi: 10.1117/12.655715.
[4] C. Codemard, M. N. Zervas, and C. A. Codemard, “High Power Fiber Lasers : A Review High Power Fiber Lasers : A Review,” vol. 20, no. September 2014, 2016.
[5] P. Parvin, M. Ilchi-Ghazaani, A. Bananej, and Z. Lali-Dastjerdi, “Modeling a CW single-frequency Yb:Silica fiber MOPA system and determination the gain and saturation in the Optimum length,” *2008 IEEE PhotonicsGlobal Singapore, IPGC 2008*, pp. 7–10, 2008, doi: 10.1109/IPGC.2008.4781513.
[6] S. Fu *et al.*, “Review of recent progress on single-frequency fiber lasers,” *J. Opt. Soc. Am. B*, vol. 34, no. 3, p. A49, 2017, doi: 10.1364/josab.34.000a49.
[7] E. Publishing and T. Challa, “Optimization of MOPA for YD-DC Fiber Laser,” *J. Optoelectron. Eng.*, vol. 2, no. 2, pp. 29–32, 2014, doi: 10.12691/joe-2-2-2.
[8] M. Ilchi-Ghazaani and P. Parvin, “Modeling of CW Yb-doped silica fiber laser by considering loss mechanism,” *Integr. Opt. Phys. Simulations*, vol. 8781, no. May 2014, p. 878118, 2013, doi: 10.1117/12.2017215.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی بررسی تحلیلی اثر پراکندگی‌های غیرخطی SBRS در لیزرهای فیبری

ایلچی قزاانی، مریم[1]

[1]پژوهشکده فوتونیک و فناوری‌های کوانتومی، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی، صندوق پستی: ۱۴۱۵۵-۱۳۳۹، تهران

چکیده

در این مقاله با در نظر گرفتن همزمان پدیده‌های پراکندگی غیرخطی بریلوین-رامان (SBRS)، مقیاس‌پذیری توان خروجی لیزرهای فیبری مورد بررسی قرار گرفته است. این مدل مبتنی بر معادلات نرخ نشان می‌دهد که آستانه اثرات SBRS به پارامترهای اصلی لیزر مانند طول فیبر، قطر هسته، غلظت مواد آلاینده، ضریب بازتاب کوپلاژ خروجی و پهنای خط لیزر وابسته است و با طراحی بهینه کاواک می‌توان به توان‌های خروجی بالا دست یافت. نتایج نشان می‌دهند که در حالی که همواره آستانه SRS بالاتر از SBS است، اما با تغییر پهنای خط سیگنال، یک نقطه بحرانی در GHz 8/48، نزدیک به پهنای خط SRS وجود دارد که در آن اولویت ظهور اثرات B یا R تغییر می‌کند.

واژه‌های کلیدی: *نوسان‌گر فیبری، پراکندگی غیرخطی غیرکشسان، پراکندگی بریلوین القایی، پراکندگی رامان القایی، موج استوکس، توان آستانه.*

Theoretical Analysis of the SBRS Nonlinear Scatterings in Fiber Lasers

Ilchi-Ghazaani, Maryam[1]

[1] *Photonics and Quantum Technology Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute (NSTRI), AEOI, P.O.Box: 1339-14155, Tehran*

Abstract

In this paper, by simultaneously considering the Brillouin-Raman nonlinear scatterings (SBRS), the power scaling of fiber lasers is investigated. This based on rate equations model shows that the SBRS thresholds depend on the main parameters of the fiber laser such as fiber length, core diameter, dopant concentration, output coupling reflection coefficient as well as laser linewidth, emphasizing that the high output powers can be achieved with optimal cavity design. The results show that while the SRS threshold is always higher than the SBS, as the signal line width changes, there is a critical point at 48.8 GHz, close to the SRS linewidth, where the priority for B or R effects changes.

***Keywords**: Fiber optics oscillator; Nonlinear Inelastic scatterings; Stimulated Brillouin scattering; Stimulated Raman scattering; Stokes wave; Threshold power.*

PACS No.: 42

مقدمه

لیزرها و تقویت‌کننده‌های تمام فیبری در بسیاری از زمینه‌های صنعتی و پزشکی که به منابع توان بالا با پهنای خط باریک در مدهای پیوسته و پالسی نیازمندند، کاربرد دارند [۱]. با این حال، هنگامی که صحبت از مقیاس‌گذاری توان خروجی به میان می‌آید، پدیده‌هایی از جمله تخریب اپتیکی، پراکندگی‌های القایی غیرخطی و اثرات حرارتی می‌توانند محدودیت‌های جدی ایجاد کنند [۲].

یکی از مهمترین موانع، اثرات غیرخطی و غیرالاستیک SBRS ناشی از ضریب پذیرفتاری غیرخطی محیط، $\chi^{(3)}$ هستند. به همین دلیل، روش‌های تئوری و تجربی بسیاری برای فرونشانی آنها پیشنهاد شده است که بر پایه کاهش همپوشانی بین باریکه سیگنال

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

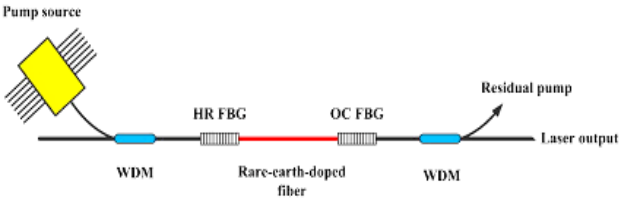
لیزر و امواج استوکس می‌باشند [۳]. به علاوه، هیچ راه حل تحلیلی دقیقی برای مدل‌سازی توزیع SBRS در لیزرها و تقویت کننده‌های فیبری وجود ندارد. این واقعیت توجه ویژه‌ای را به سمت پاسخ‌های عددی جلب می‌کند [۴].

در این تحقیق، به کمک مجموعه‌ای از معادلات دیفرانسیل معمولی جفت شده، آستانه اثرات SBRS در شرایط مختلف کاواک لیزر به کمک شبیه‌سازی‌های عددی مورد بررسی قرار می‌گیرد تا بهینه شرایط عملکرد لیزر در توان‌های بالا به دست آید.

در پدیده SRS، گذارهای ارتعاشی مولکولی از طریق فونون‌های نوری دخیل هستند در حالی‌که SBS از طریق برهم‌کنش فونون‌های آکوستیکی ظاهر می‌شوند. از اینرو، SBS فقط در جهت مخالف انتشار سیگنال دیده می‌شود، در حالی‌که SRS می‌تواند در هر دو جهت همسو و ناهمسو با سیگنال لیزر رخ دهد.

معادلات آهنگ جفت شده با SBRS

ساختار اصلی یک لیزر فیبری با دمش انتهایی در آرایش کاواک خطی در شکل ۱ آمده است که از یک فیبر آلاییده به ایتربیم (Yb)، ترکیب کننده‌ها، یک جفت توری فیبری براگ (FBG) و لیزرهای دیودی دمش تشکیل شده است. منابع دمش لیزرهای دایودی در ۹۷۵ nm هستند که بیشینه توان ۷ kW را به غلاف داخلی فیبر تزریق می‌کنند و در نتیجه سیگنال لیزر در قله ۱۰۸۵ nm با پهنای باند ۱۰ GHz ایجاد می‌شود.



شکل ۱ : شمای لیزر فیبری دوغلافی آلاییده به Yb در مد دمش انتهایی

برای به حداقل رساندن اثرات پراکندگی محدود کننده بر عملکرد لیزر، مدل جامعی مبتنی بر معادلات نرخ با در نظر گرفتن توزیع فضایی توان‌های سیگنال و SBRS مورد نیاز است که در روابط (۱) تا (۳) آمده است [۵]:

$$\frac{dP_p^+(z)}{dz} = \Gamma_p[(\sigma_{ap}+\sigma_{ep})N_2(z)-\sigma_{ap}N]P_p^+(z)-\alpha_p P_p^+(z) \quad (۱)$$

$$\frac{dP_s^{\pm}(z)}{dz} = \pm\Gamma_s[(\sigma_{as}+\sigma_{es})N_2(z)-\sigma_{as}N]P_s^{\pm}(z)\mp\alpha_s P_s^{\pm}(z)\pm\Gamma_s\sigma_{es}N_2(z)P_0(\lambda)\mp\frac{g_i}{A_{eff}}P_i^{\mp}(z)P_s^{\pm}(z) \quad (۲)$$

$$\frac{dP_i^{\pm}(z)}{dz} = \mp\alpha_i P_i^{\pm}(z)\pm\frac{g_i}{A_{eff}}P_s^{\mp}(z)P_i^{\pm}(z) \quad , \quad i=B,R \quad (۳)$$

$$\frac{N_2(z)}{N} = \frac{\Gamma_p\lambda_p\sigma_{ap}[P_p^+(z)+P_p^-(z)]+\Gamma_s\lambda_s\sigma_{as}[P_s^+(z)+P_s^-(z)]}{\Gamma_p\lambda_p(\sigma_{ap}+\sigma_{ep})[P_p^+(z)+P_p^-(z)]+\frac{hcA_{eff}}{\tau}+\Gamma_s\lambda_s(\sigma_{as}+\sigma_{es})[P_s^+(z)+P_s^-(z)]} \quad (۴)$$

همچنین، ضریب وابسته به پهنای خط g_i، بهره SBS/SRS است که با معادله زیر توضیح داده شده است [۶]:

$$g_i = g_{0i}\frac{\Delta\nu_i}{\Delta\nu_s+\Delta\nu_i} \quad (۵)$$

که در آن، g_{0i} ثابت بهره ذاتی SBRS است و $\Delta\nu_s$ و $\Delta\nu_i$، پهنای باند لیزر و B یا R را نشان می‌دهند.

در معادلات جفت شده فوق، علائم ± مربوط به جهت انتشار رو به جلو و عقب در امتداد محور z است. پارامترهای مختلف در طول موج‌های دمش، سیگنال و امواج B/R مرتبه اول با زیرنویس‌های p، s و i معرفی شده‌اند. در اینجا، از اثرات امواج استوکس مرتبه‌های بالاتر به دلیل تمرکز بر توان آستانه پراکندگی‌های غیرخطی، چشم‌پوشی می‌شود. معادلات فوق با شرایط اولیه و مرزی زیر حل می‌شوند:

$$P_p^+(0) = \eta\times P_p^+(tot) \quad (۶)$$

$$P_s^+(0) = R_1\times P_s^-(0) \quad (۷)$$

$$P_s^-(L) = R_2\times P_s^+(L) \quad (۸)$$

$$P_i^+(0) = R_{1i}\times P_i^-(0) \quad (۹)$$

$$P_i^-(L) = R_{2i}\times P_i^+(L) \quad (۱۰)$$

که در آن، $P_P^+(tot)$ کل توان دمش تزریق شده به محیط فعال لیزر است و η، تلفات جفت‌شدگی را نشان می‌دهد. علاوه بر این، (R_1) و (R_2) به ترتیب ضرایب بازتاب آینه‌های ورودی و خروجی را در طول موج سیگنال نشان می‌دهند.

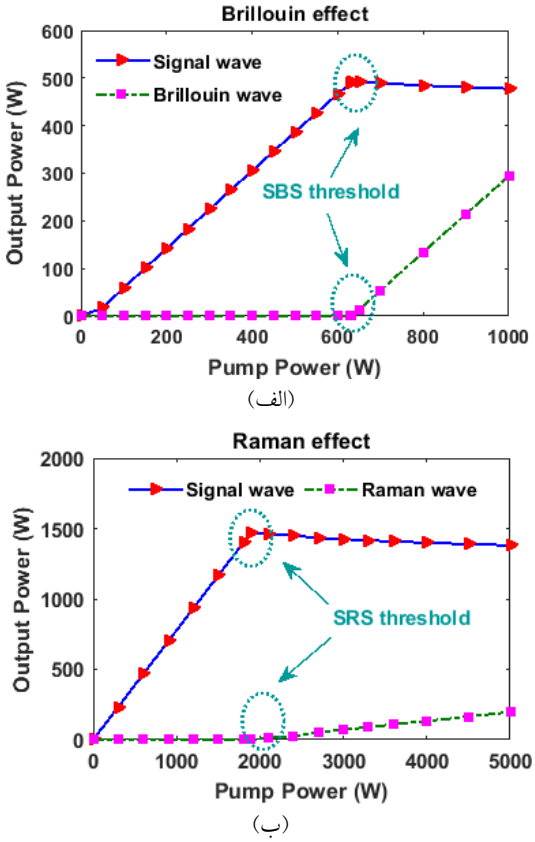
بحث و نتیجه‌گیری

برای نشان دادن ویژگی‌های آستانه SBS و SRS و محدودیت‌های آن‌ها در مقیاس توان لیزرهای فیبر دوپ‌شده با توان

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

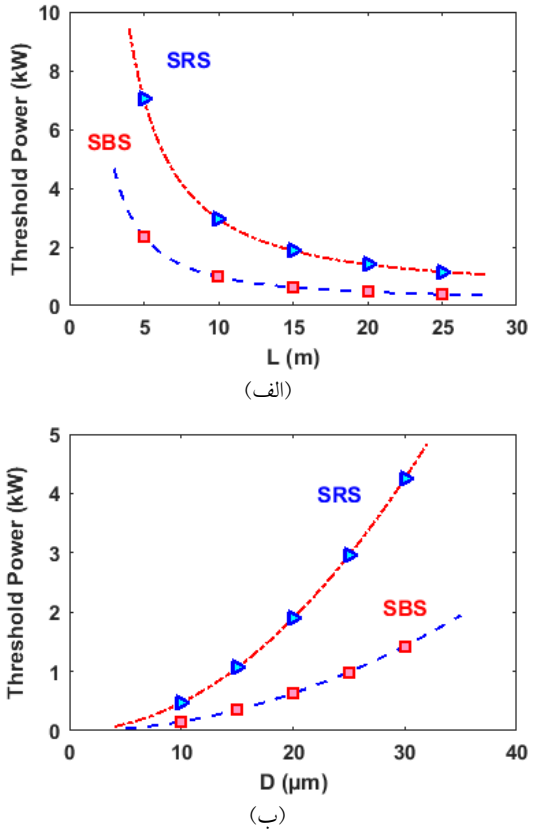
بالا Yb، شبیه‌سازی‌های عددی با حل معادلات نرخ اصلاح‌شده انجام می‌شوند.

نمودار تغییرات توان خروجی سیگنال لیزر و همچنین توان خروجی (الف) بریلوئین و (ب) رامان بر حسب توان دمش فرودی در شکل۲ نشان داده شده است. مطابق شکل، با افزایش توان دمش، توان خروجی لیزر به صورت خطی با بازده شیب (الف) ۸۱٫۷ ٪ و (ب) ۷۷٫۸ ٪ افزایش می‌یابد. با رسیدن به توان آستانه اثرات غیرخطی در توان دمش (الف) ۶۳۲ W و (ب) ۱۸۹۰ W، بخش قابل توجهی از توان سیگنال رو به جلو پراکنده می‌شود. در همان زمان، موج استوکس به صورت خطی رشد می‌کند و بازده آن افزایش می‌یابد. بر اساس این تحلیل، رشد بریلوئین در حدود ۱۲ برابر برابر سریعتر از رامان است.



شکل۲. توان آستانه (الف) SBS و (ب) SRS در لیزر فیبر با طول m ۱۵ و قطر هسته µm ۲۰

شکل۳ تغییرات توان‌های آستانه SBRS مرتبه اول را برحسب (الف) طول محیط بهره و (ب) قطر هسته فیبر در توان دمش کل ۷ kW نشان می‌دهد. آستانه SBRS با کاهش طول فیبر و افزایش قطر هسته (فیبرهای چند مدی) به صورت نمایی افزایش می‌یابد که از کاهش طول برهمکنش میان امواج سیگنال و استوکس ناشی می‌شود. همچنین، اختلاف میان آستانه‌های SBS و SRS، در طول‌های بزرگ‌تر (۲۵ m) و قطرهای کمتر (۱۰ µm)، ناچیز است. به عبارت دیگر، در این شرایط هر دو اثر غیرخطی تقریباً همزمان ظاهر می‌شوند و توان خروجی لیزر به شدت افت می‌کند.

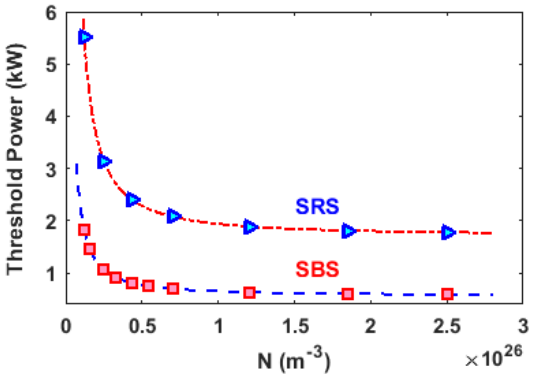


شکل۳. اثر تغییر طول فیبر (الف) و قطر هسته فیبر (ب) بر توان آستانه SBRS

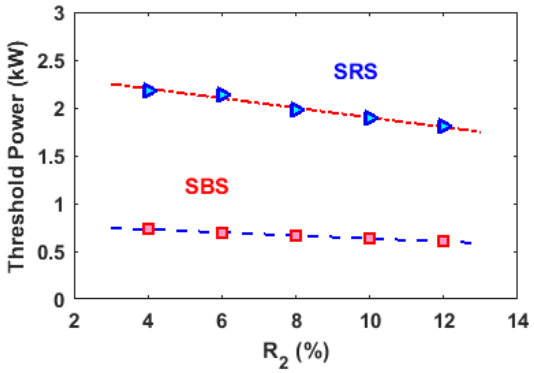
یکی دیگر از راهکارهای افزایش توان لیزرهای فیبری و جلوگیری از ظهور اثرات غیرخطی SBRS، تغییر غلظت مواد آلاینده در محیط فعال فیبر است. با توجه به شکل۴، کاهش غلظت یک راه سودمند برای کاهش اثرات مضر پراکندگی‌های غیر کشسان است. در واقع، غلظت آلایندگی زیاد در لیزرهای فیبری سبب همپوشانی بیشتر باریکه سیگنال و امواج استوکس می‌شود که با کاهش شدید وارونگی جمعیت تراز بالایی محیط بهره همراه است، و پرتوهای ناخواسته پس پراکنده را تقویت می‌کند.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

شبیه‌سازی‌ها در شکل۵ نشان می‌دهند که ضریب بازتاب کوپلاژ خروجی یکی دیگر از پارامترهای مهم برای حذف کارآمد فرآیندهای SBRS در نوسانگرهای فیبری است که با دستیابی به توان خروجی و بازده بالاتر لیزر سازگار است. با توجه به شیب ملایم تغییرات SBS، می‌توان دریافت که نرخ فروپاشی توان SRS در R_2 های حدود ۴٪ بیشینه است و به تدریج با افزایش ضریب بازتاب آینه، به صورت خطی کاهش می‌یابد.

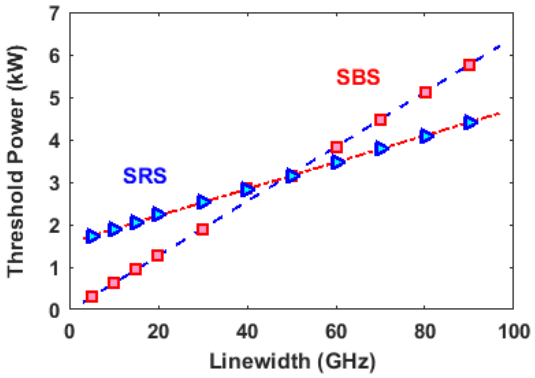


شکل۴. اثر تغییر غلظت مواد آلاینده بر توان آستانه SBRS



شکل۵. اثر تغییر ضریب بازتاب کوپلاژ خروجی بر توان آستانه SBRS

در نهایت، اثر تغییرات پهنای خط لیزر در حذف موانع پراکندگی‌های غیرخطی در شکل ۶ مورد بررسی قرار گرفت. مطابق شکل، توان آستانه SBRS به صورت خطی با گسترش پهنای باند سیگنال افزایش می‌یابد. نکته قابل توجه در این شکل آن است که پس از رسیدن به حد بحرانی پهنای باند ۴۸٫۸ GHz، آستانه اثرات غیرخطی وارونه می‌شود و اثر رامان از بریلوئین پیشی می‌گیرد و فرآیند غالب است. این مقدار بحرانی، نزدیک به پهنای باند SRS (۵۰ GHz) است.



شکل۶. اثر تغییر پهنای باند لیزر بر توان آستانه SBRS

نتیجه‌گیری

در این مقاله، به کمک مدل‌های نظری و عددی، ویژگی‌های حالت پایدار لیزرهای فیبری دوغلافی آلاییده با آرایش کاواک خطی توان بالا مورد بررسی قرار گرفت. تمرکز اصلی مقاله بر پراکندگی‌های محدود کننده غیرخطی SBRS و پارامترهای وابسته به آن است. نتایج نشان می‌دهند توان آستانه SBRS را می‌توان با کوتاه کردن طول محیط فعال، بکارگیری فیبرهای چند مدی به جای فیبر تک مد، کاهش غلظت مواد آلاینده در فیبر و همچنین کاهش ضریب بازتاب آینه خروجی بهبود بخشید. از سوی دیگر، اگرچه افزایش پهنای باند لیزر به طور مؤثری آستانه پراکندگی‌های غیرکشسان SBRS را به تأخیر می‌اندازد، اما رقابتی بین پرتوهای استوکس رامان و بریلوئین وجود دارد که در پهنای باند رامان (~۵۰ GHz) رخ می‌دهد.

مراجع

[1] J. Nagel, V. Temyanko, J. Dobler, M. Likhachev, M. Bubnov, E. Dianov, et al., "Cascaded gain fibers for increasing output power and the stimulated Brillouin scattering threshold of narrow linewidth fiber Raman amplifiers," *Applied optics*, vol. 55, pp. 4066-4072, 2016.
[2] D. Payne, Y. Jeong, J. Nilsson, J. Sahu, D. Soh, C. Alegria, et al., "Kilowatt-class single-frequency fiber sources," *in Fiber lasers II: technology, systems, and applications*, 2005, pp. 133-141.
[3] H. Xu, M. Jiang, C. Shi, P. Zhou, G. Zhao, and X. Gu, "Spectral shaping for suppressing stimulated-Raman-scattering in a fiber laser," *Applied optics*, vol. 56, pp. 3538-3542, 2017.
[4] A. Liu, X. Chen, M.-J. Li, J. Wang, D. T. Walton, and L. A. Zenteno, "Comprehensive modeling of single frequency fiber amplifiers for mitigating stimulated Brillouin scattering," *Journal of lightwave technology*, vol. 27, pp. 2189-2198, 2009.
[5] M. Ilchi-Ghazaani and P. Parvin, "Distributed scheme versus MOFPA array on the power scaling of a monolithic fiber laser," *IEEE Journal of quantum electronics*, vol. 50, pp. 698-708, 2014.
[6] H. A. Alasadi, M. Al-Mansoori, M. Saripan, and M. Mahdi, "Brillouin linewidth characterization in single mode large effective area fiber through co-pumped technique," *International Journal of Electronics, Computer and Communications Technologies*, vol. 1, pp. 16-20, 2010.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تولید ابرپیوستار در موجبر نیوبات لیتیوم با اثر غیرخطی درجه دو با استفاده از سالیتون‌های تاریک مراتب بالا

صادقی، میثم[۱]؛ حاتمی، محسن[۲]

[۲،۱] دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شیراز، بلوار مدرس، شیراز

چکیده

از دهه ۱۹۶۰ تاکنون، نیوبات لیتیوم یکی از ماده‌های پر کاربرد و جذاب در فوتونیک می‌باشد. علت آن ویژگی‌های فوق‌العاده غیرخطی این ماده است. تولید های نیوبات لیتیوم نازک تهیه شده با کیفیت بالا اخیرا ابرپیوستار ناشی از برهمکنش غیرخطی و پاشندگی نوری است. به دنبال کارهای جدید انجام شده، لایه بصورت تجاری ساخته و استفاده شده‌اند. در اینجا با استفاده از این ماده یک موجبر لیتیوم نیوبات با ضخامت لایه‌های در حدود میکرومتر و برای طول موج-های در محدوده مخابراتی طراحی کرده ایم. با عبور پالس نوری از لایه نازک نیوبات لیتیوم به علت داشتن سطح مقطع خیلی کم اثرات غیرخطی زیادی از جمله ابرپیوستار ایجاد می‌شود. این ابرپیوستار برای سالیتون تاریک مرتبه ۱۰ در فاصله ۲۵۰ میلی‌متری ۳ برابر پهنای اولیه شد که برای مدار مجتمع نوری مناسب است.

واژه های کلیدی: *اثر غیرخطی درجه دو، پالس نوری، تولید ابرپیوستار، نیوبات لیتیوم.*

Supercontinuum generation in lithium niobate waveguide with second order nonlinear effect using higher orders dark solitons

Sadeghi, Meysam[1]; Hatami, Mohsen[2]

[1,2] Department of Physics, Shiraz University of Technology, Shiraz

Abstract

From the 1960s until now, Lithium Niobate is one of the most widely used and attractive materials in photonics. It is due to its extraordinary nonlinear properties. Supercontinuum generation is due to nonlinear interaction and optical dispersion. Looking for new works done, High quality thin lithium niobate layers have recently been commercially manufactured and used. Here using this material, we have designed a lithium niobate waveguide with layer thicknesses of about micrometers and for wavelengths in the telecommunication range. By passing a light pulse through a thin layer of lithium niobate Due to the very low cross section, many nonlinear effects are created such as supercontinuum. This supercontinuum occurred for the 10th order dark soliton at a distance of 250mm 3 times the initial width, which is proper for an optical integrated circuit.

***Keywords**: Lithium Niobate, Optical pulse, Second order nonlinear effect, Supercontinuum generation.*

PACS No.

مقدمه

تولید ابرپیوستار ناشی از برهمکنش غیرخطی و پاشندگی نوری است. در دهه اخیر توسعه عظیمی در زیرساخت مدارهای مجتمع نوری به وجود آمده که ابرپیوستار را با مدیریت توان پمپ‌ها فعال می‌کند [۱]. مدارهای مجتمع نوری تولید شده توسط نیوبات لیتیوم، مناسب برای تولید طیف‌های نوری با پهنای باند

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

وسیع و همدوس است. بخاطر خواص غیرخطی زیاد و همچنین تمرکز نوری زیاد، اجازه تولید مؤثر ابرپیوستار با پالس‌های کوتاه به اندازه کافی با استفاده از طول موجبر کوتاه را می‌دهد [۲-۳]. نیوبات لیتیوم یک ماده عالی و پرکاربرد است که چند دهه است تأثیر زیادی در زندگی روزمره ما گذاشته است. از فعالسازی ارتباطات پرسرعت نوری که ستون اصلی اینترنت است تا فیلتر بسامد رادیویی استفاده شده در تلفن‌های همراه. موفقیت در تولید فیلم‌های نازک نیوبات لیتیوم بر عایق با کیفیت بالا توام با پیشرفت‌های فن‌آوری‌های نانو ساخت، ایجاد مدارهای مجتمع نانوفوتونیک با کیفیت بالا را امکان پذیر کرد. در این مقاله ابتدا معادلات غیرخطی را معرفی و سپس پارامترهای مورد نیاز برای این معادله را با استفاده از نرم افزار لومریکال بدست آورده و در نهایت معادله غیرخطی را با استفاده از تلفیق روش عددی تفاضل متناهی و رانگ کوتا جهت تولید ابرپیوستار شبیه سازی می‌کنیم.

معادلات ریاضی

نیوبات لیتیوم دارای خواص غیرخطی با مقادیر بزرگ $n_2 = 2\times10^{-19} m^2/W$ و $\chi^{(2)} = 40pm/V$ و $\chi^{(3)} = 1.6\times10^{-21} m^2/V^2$ است که آن را به یک سکوی ایده‌آل برای فوتونیک غیرخطی تبدیل کرده است [۴-۵].

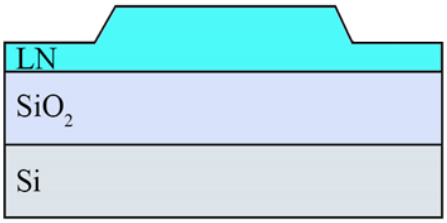
معادله غیرخطی انتشار پالس در موجبر، معادله تعمیم یافته غیرخطی شرودینگر با دامنه کندتغییر A(z,t) است:

$$\frac{\partial A}{\partial Z} + i\hat{D}A(z,t) = i\left(1+\frac{i}{\omega_0}\frac{\partial}{\partial t}\right)\times\left[\chi(z)(A^2e^{-i\varphi(z,t)} + |A|^2 e^{i\varphi(z,t)})\right] + \gamma\left(|A|^2 A + A\int dt' R(t,t')|A|^2(t')\right) \qquad (۱)$$

که $\hat{D} = \sum_{j=2}\frac{1}{j!}k_j(i\frac{\partial}{\partial t})^j$ عملگر پاشندگی، $\chi(z) = \frac{\chi^{(2)}(z)\omega_0^2}{4\beta_0 c^2}$، $\varphi(z,t) = \omega_0 t - (\beta_0 - \beta_1\omega_0)z$، $\gamma = \frac{n_2\omega_0}{cA_{eff}}$ پارامتر غیرخطی کر، $\tau = \frac{t}{t_0}$، $R(t,t')$ تابع پاسخ رامان برای ماده نیوبات لیتیوم و f_R کسر رامان و برابر با 0.58 است [۶].

شبیه سازی

پارامترهای مورد استفاده برای شبیه‌سازی انتشار سالیتون در معادله غیرخطی (۱) را با استفاده از نرم افزار لومریکال در موجبر نیوبات لیتیوم بدست آورده و در جدول شماره ۱ و ۲ نشان داده‌ایم. لازم به ذکر است که موجبر بطور عملی قابل ساخت است که شکل ۱ آن را نشان می‌دهد. موجبر طراحی شده شامل دو لایه سیلیکون و سیلیکا و دو لایه نیوبات لیتیوم با ضخامت ۱ میکرومتر و کمتر می‌باشد. چنین موجبری برای طول موج‌های در محدوده مخابراتی طراحی می‌شود.



شکل ۱: موجبر شبیه سازی شده نیوبات لیتیوم.

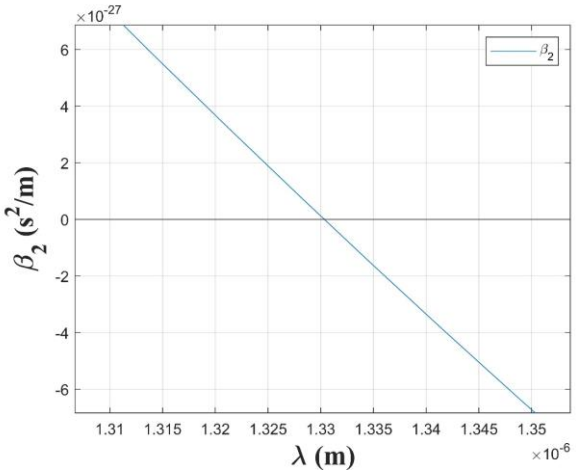
جدول ۱: برخی از پارامترها برای تولید ابرپیوستار لیتیوم که با استفاده از نرم افزار لومریکال بدست آورده ایم.

λ	n_{eff}	A_{eff}	v_g	γ
1.325 (μm)	2.04	0.79 (μm^2)	1.27×10^8 $(\frac{m}{s})$	1.19 $(\frac{1}{m^2 s})$

جدول ۲: ثابت انتشار و پاشندگی با مرتبه‌های مختلف در موجبر نیوبات لیتیوم که با استفاده از نرم افزار لومریکال و متلب بدست آورده‌ایم.

β	β_1	β_2	β_3	β_4
9.70×10^6 $(\frac{1}{m})$	7.89×10^{-9} $(\frac{s}{m})$	1.89×10^{-27} $(\frac{s^2}{m})$	3.32×10^{-40} $(\frac{s^3}{m})$	3.32×10^{-55} $(\frac{s^4}{m})$

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

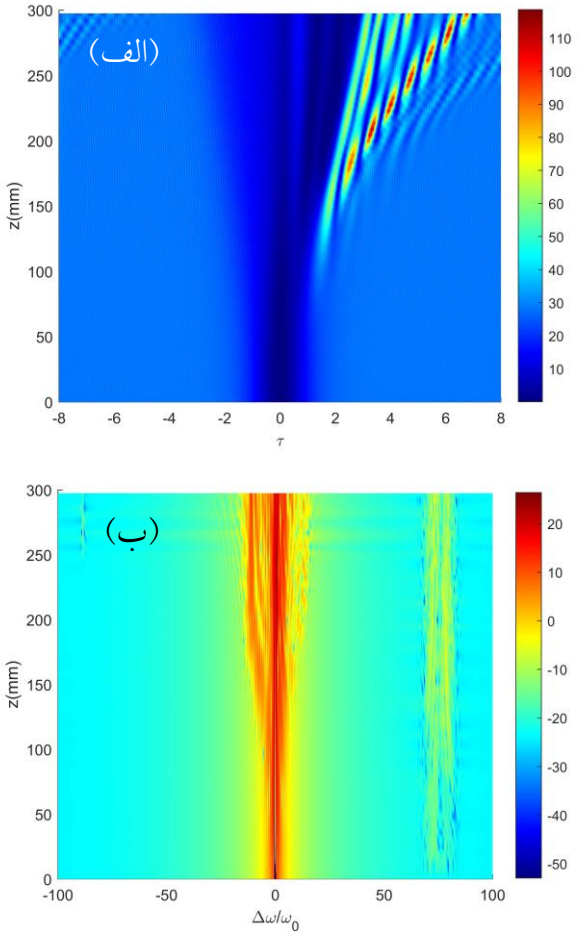


شکل ۲: نمودار پاشندگی موجبر شبیه سازی شده نیوبات لیتیوم که با استفاده از شبیه‌سازی در نرم افزار لومریکال بدست آمده است. محور افقی برحسب متر و عمودی بر حسب s^2/m است.

برای تولید ابرپیوستار با سالیتون‌های تاریک بایستی طول موجی انتخاب شود که در آن مقدار پاشندگی مایل به صفر و مثبت باشد. که در اینجا طول موج 1.325 µm در نظر گرفته شده است. پالس نوری را به صورت انتشار سالیتون تاریک با مرتبه N=10 در نظر گرفته ایم که $N = L_D \gamma P_0$. پالس نوری از لایه نیوبات لیتیوم عبور می‌کند و به علت داشتن سطح مقطع خیلی کم اثرات غیرخطی زیادی از جمله ابرپیوستار ایجاد می‌شود.

شکل ۳ چگالی توان اتشاری سالیتون تاریک مرتبه ۱۰ در موجبر نیوبات لیتیوم طراحی شده را نشان می‌دهد. شکل ۳ الف چگالی توان در حوزه زمان است که با انتشار شدت آن به سمت رنگ قرمز رفته و دچار شکافت سالیتونی شده و متمرکز می‌شود، در عوض در شکل ۳ ب در حوزه بسامد پهن می‌شود. مقدار این پهن شدگی در حوزه بسامد در فاصله ۲۵۰ میلی‌متری به ۳ برابر مقدار اولیه می‌رسد.

چنین ابعاد کوچکی برای استفاده از طیف ابرپیوستار در مدارهای مجتمع نوری مناسب است.



شکل ۳: چگالی توان انتشاری سالیتون تاریک مرتبه ۱۰ در موجبر نیوبات لیتیوم برای تولید ابرپیوستار در حوزه الف) زمان ب) بسامد

نتیجه گیری

نیوبات لیتیوم یک ماده غیرخطی با $\chi^{(2)}$ بزرگ است که آن را به یک ماده پرکاربرد در حیطه اپتیک غیرخطی تبدیل کرده است. ما تولید ابرپیوستار به کمک موجبر ساخته شده با این ماده را بررسی کردیم. به دلیل خواص غیرخطی فوق‌العاده نیوبات لیتیوم و انتخاب طول موجی با پاشندگی نزدیک به صفر ابرپیوستار تولید کردیم. این طیف ابرپیوستار برای سالیتون تاریک مرتبه ۱۰ در فاصله ۲۵۰ میلی‌متری پدید آمد که پهنای آن در حوزه بسامد در این فواصل به اندازه ۳ برابر پهنای اولیه است. چنین ابعادی برای استفاده در مدارهای مجتمع نوری مناسب است.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مرجع‌ها

[1] Dudley J. M.,Genty G., and Coen S., "Supercontinuum generation in photonic crystal fiber," *Rev. Mod. Phys.* **78**(4), 1135–1184 (2006).

[2] Johnson A. R., Mayer A. S., Klenner A., Luke K., Lamb E. S., Lamont M. R. E., Joshi C., Okawachi Y., Wise F. W., Lipson M., Keller U., and Gaeta A. L., "Octave-spanning coherent supercontinuum generation in a silicon nitride waveguide," *Opt. Lett.* **40**(21), 5117–5120 (2015).

[3] Porcel M. A. G., Schepers F., Epping J. P., Hellwig T., Hoekman M., Heideman R. G., van der Slot P. J. M., Lee C. J., and Boller K. J., "Two-octave spanning supercontinuum generation in stoichiometric silicon nitride waveguides pumped at telecom wavelengths," *Opt. Express* **25**(2), 1542–1554 (2017).

[4] Okawachi Y., Yu M., Desiatov B., Kim B. Y., Hansson T., Lončar M., and Gaeta A. L., "Chip-based selfreferencing using integrated lithium niobate waveguides," *Optica* **7**(6), 702–707 (2020).

[5] Wang C., Zhang M., Yu M., Zhu R., Hu H., and Loncar M., "Monolithic lithium niobate photonic circuits for Kerr frequency comb generation and modulation," *Nat. Commun.* **10**(1), 978 (2019).

[6] Kowligy A. S., Lind A., Hickstein D. D., Carlson D. R., Timmers H., Nader N., and Diddams S. A. Mid-infrared frequency comb generation via cascaded quadratic nonlinearities in quasi-phase-matched waveguides. *Optics letters*, **43**(8), 1678-1681 (2018).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

پدیده جابه‌جایی جانبی گوس-هانچِن در فراماده غیرهرمیتی یک‌بُعدی

محمدپور، علی ؛ بروستانی، جمال ؛ سلطانی والا، علی

دانشکده فیزیک دانشگاه تبریز ، تبریز

چکیده

در این مقاله، پدیده جابه‌جایی جانبی گوس-هانچِن در فراماده غیرهرمیتی یک بُعدی، برای طیف‌های عبور و بازتاب روبه‌جلو و روبه‌عقب مورد مطالعه قرار گرفته است. با تغییر پارامترهای مختلف مربوط به ساختار، ویژگی‌های اپتیکی سامانه با به‌کارگیری روش ماتریس انتقال، بررسی شده است. ابتدا برای یک ساختار دولایه با تعریف ضرایب دی‌الکتریک مشخص، طیف‌های عبور و بازتاب و جابه‌جایی جانبی در محدوده‌ی بسامدی معین بدست آمده و موقعیت نقاط جذب کامل همدوس-لیزری شدن، شناسایی شده است. در قدم بعدی، با تغییر زوایای موج فرودی به ساختار، به ازای دو زاویه مشخص، خاصیت نامرئی‌سازی تک سویه و مقادیر جابه‌جایی جانبی در این نقاط محاسبه شده است. در نهایت، با بررسی طیف‌های عبور و بازتاب و همچنین فازهای مرتبط با این طیف‌ها، بر حسب تغییرات تعداد سلول‌های واحد مربوط به ساختار، یک رفتار شبه‌دوره‌ای با افزایش تعداد سلول‌های واحد بدست آمده و ملاحظه شده است که به ازای نقاط مشخصی از این تعداد، پرش‌های فازی به مقدار π، مرتبط با طیف‌های بازتاب بدست می‌آید و خاصیت نامرئی‌سازی دوسویه که به ندرت در ساختارهایی از این دست دیده می‌شود، به طور مشخص اندازه‌گیری شده است.

واژه های کلیدی: *تقارن پاریته-زمان، جابه‌جایی جانبی گوس-هانچِن، جذب کامل همدوس، نامرئی‌سازی.*

Goos-Hänchen Lateral Shift Phenomenon in One-Dimensional Non-Hermitian Metamaterials

Mohammadpour, Ali; Barvestani, Jamal; Soltani Vala, Ali

Faculty of Physics, University of Tabriz, Tabriz, Iran

Abstract

In this paper, the Goos-Hänchen lateral shift phenomenon in one-dimensional non-Hermitian metamaterials is studied for the transmission and forward and backward reflection spectra. By changing the miscellaneous parameters related to the structure, using the transfer matrix method the optical properties of the system have been investigated. First, for a bilayer structure by defining specific dielectric coefficients, the transmission and reflection spectra and lateral shift in a certain frequency range are obtained and the position of the coherent perfect absorption-laser points is identified. In the next step, by changing the angles of the incident wave to the structure, for two specific angles, the unidirectional invisibility property and the lateral shift values at these points are calculated. Finally, by investigating the transmission and reflection spectra as well as the phases associated with these spectra, in terms of changes in the number of unit cells related to structure, a quasi-periodic behavior is obtained by increasing the number of unit cells and it is observed that for certain points of this number, phase hopping are obtained which related to the reflection spectra and the bidirectional invisibility property, which is rarely seen in such structures, is specifically measured.

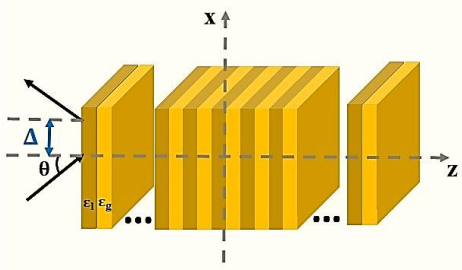
***Keywords**: Parity-time symmetry, Goos-Hänchen lateral shift, Coherent perfect absorption, Invisibility.*

PACS No. 78.67.Pt.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مقدمه

هرمیتی بودن هر عملگر که مستقیماً متناسب با یک مشاهده‌پذیر فیزیکی می باشد، یکی از فرض‌های اساسی در مکانیک کوانتومی بوده و طبق تعریف، عملگرهای هرمیتی دارای ویژه مقادیری حقیقی می‌باشند. مطالعات انجام شده در دو دهه اخیر نشان می‌دهد که برخی از عملگرهای غیرهرمیتی نظیر هامیلتونی‌های غیرهرمیتی با پتانسیل مختلط، در صورت ارضای شرط تقارن پاریته–زمان $V(\vec{r}) = V^*(-\vec{r})$، می‌توانند دارای ویژه‌مقادیر حقیقی باشند[۱]. در حال حاضر به کارگیری مفاهیم مرتبط با تقارن پاریته–زمان از چارچوب مکانیک کوانتومی فراتر رفته و به یکی از موضوعات اساسی در حوزه اپتیک، آکوستیک و الکترونیک بدل شده است[۲]. در حیطه فوتونیک، شرط تقارن پاریته–زمان می‌طلبد که تابع شاخص شکست مربوط به یک ساختار بس‌لایه‌ای، همانند پتانسیل مختلط رفتار کرده و قسمت حقیقی آن، تابع زوجی نسبت به مکان بوده $n_R(\vec{r}) = n_R(-\vec{r})$ و معرف سرعت فاز می‌باشد، در حالی که قسمت موهومی تابع فردی نسبت به مکان بوده $n_I(\vec{r}) = -n_I(-\vec{r})$ و بیانگر تضعیف(اتلاف $n_I(\vec{r}) > 0$) یا تقویت(بهره $n_I(\vec{r}) < 0$) می‌باشد[۳و۴]. فراموا د با تقارن پاریته–زمان، ویژگی‌های جالب توجهی نظیر خاصیت نامرئی‌سازی[۵]، جابه‌جایی جانبی در طیف‌های بازتاب و شکست[۶]، جذب کامل همدوس و گذار فاز در نقاط استثنائی و لیزری[۷] از خود به نمایش می‌گذارند. پدیده گوس–هانچِن که برای اولین بار به صورت تجربی در سال ۱۹۴۷، مشاهده شد[۸]، بیانگر یک جابه‌جایی جانبی در فصل مشترک دو محیط، برای طیف‌های بازتاب شده می‌باشد که در نزدیکی لبه‌ی ساختارهای فوتونی با گاف نواری و حالت‌های نقص مشاهده می‌شود، که با به کارگیری و تعریف آن در سامانه‌های مختلف نظیر بلورهای فوتونی، محیط‌های اتلافی، فراموا د هذلولوی، فراسطوح و ... مقدار آن افزایش می‌یابد. در این مقاله، یک سامانه بس‌لایه‌ای با تقارن پاریته–زمان در نظر گرفته شده، که از لایه‌های دی‌الکتریک با شاخص شکست مشخص، تشکیل یافته است. موج الکترومغناطیسی با قطبش میدان مغناطیسی عرضی(TM)، به صورت مایل وارد ساختار می‌شود. تغییرات طیف‌های عبور و بازتاب و فازهای مرتبط با طیف‌ها، همگی بر حسب تغییرات فرکانس، زاویه موج فرودی و تعداد سلول‌های واحد مورد بررسی قرار گرفته است. پدیده جابه‌جایی جانبی گوس–هانچِن، با تغییر فازهای مربوط به طیف‌های بازتاب، مطالعه شده و رفتار این پدیده در نزدیکی نقاط جذب کامل همدوس–لیزری و نحوه وابستگی آن به زاویه موج فرودی مطالعه شده است.



شکل۱ : طرحواره‌ای از فراموا د غیرهرمیتی یک بُعدی.

تئوری و ساختار

مطابق شکل۱، یک ساختار بس‌لایه‌ای متشکل از لایه‌های دی الکتریک که دو به دو نسبت به مبدأ دارای تقارن پاریته–زمان می‌باشند، با ضرایب دی‌الکتریک مزدوج مختلط به صورت $\varepsilon_1 = \varepsilon' + i\varepsilon''$ و $\varepsilon_g = \varepsilon' - i\varepsilon''$ که به ترتیب معرّف محیط‌های اتلاف و بهره می‌باشند، در کنار هم قرار گرفته‌اند. قسمت حقیقی و موهومی ضرایب دی‌الکتریک برابر با یکدیگر، به اندازه ($\varepsilon' = \varepsilon'' = ۰/۱$) در نظر گرفته شده است و ساختار به طور مشخص، ابتدا به صورت دولایه دارای یک سلول واحد بوده و ضخامت هر لایه برابر $d = ۱۲۷\mu m$ می‌باشد. موج الکترومغناطیسی فرودی ابتدا با زاویه $\theta = ۵^\circ$ درجه وارد ساختار می‌شود. با استفاده از روش ماتریس انتقال[۹]، طیف‌های عبور و بازتاب را بدست آورده و فازهای مرتبط با این طیف‌ها را محاسبه می‌نماییم. بدین ترتیب، طبق رابطه ۱، برای ماتریس انتقال تک‌لایه jام به ضخامت d، داریم:

$$m_j = \begin{pmatrix} \cos(k_{jz}d) & i\frac{1}{q_j}\sin(k_{jz}d) \\ iq_j\sin(k_{jz}d) & \cos(k_{jz}d) \end{pmatrix} \qquad (۱)$$

که در این رابطه $k_{jz} = k_0\sqrt{\varepsilon_j - \sin^2\theta}$ معرف بردار موج در راستای محور z و همچنین داریم: $q_j = \frac{\sqrt{\varepsilon_j - \sin^2\theta}}{\varepsilon_j}$. ماتریس انتقال کلی مربوط به ساختار، با رابطه $M = (m_j m_{j+1})^N$ بیان شده و N نشان دهنده تعداد سلول‌های واحد می‌باشد. مقادیر مؤلفه‌های عبور و بازتاب روبه‌جلو با رابطه ۲، بیان می‌شوند:

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

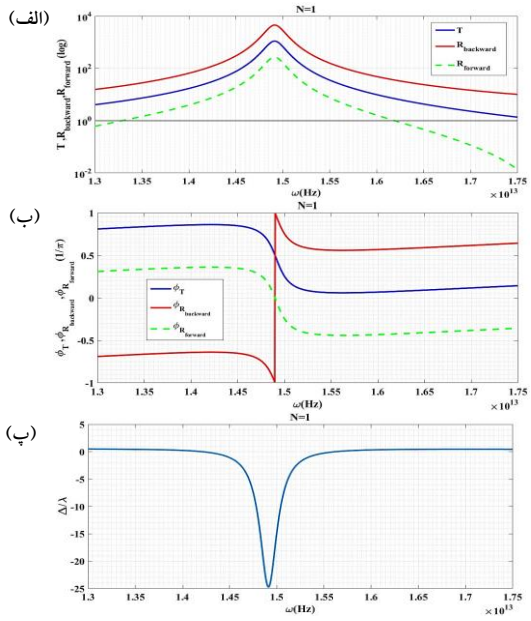
$$t=\frac{2}{M_{11}+M_{12}\delta_0+\frac{M_{21}}{\delta_0}+M_{22}} \quad ; \quad r_f=\frac{M_{11}+M_{12}\delta_0-\frac{M_{21}}{\delta_0}-M_{22}}{M_{11}+M_{12}\delta_0+\frac{M_{21}}{\delta_0}+M_{22}} \qquad (۲)$$

که در این رابطه $\delta_0=\sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}(1-\sin^2\theta)}$ بوده که ε_0 و μ_0 ضرایب مربوط به محیط اطراف ساختار می باشد، که برابر یک در نظر گرفته می‌شود. جابه‌جایی جانبی طیف‌های عبور و بازتاب، توسط رابطه ۳، بیان شده که در آن φ معرف فاز مربوط به این طیف‌ها و λ طول موج نور فرودی می‌باشد.

$$\frac{\Delta}{\lambda}=-\frac{1}{2\pi}\frac{d\varphi}{d\theta} \qquad (۳)$$

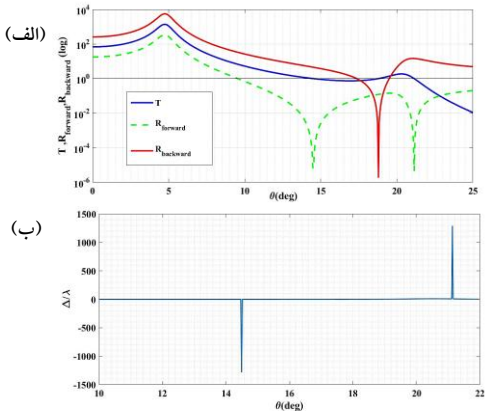
نتایج

همانطور که در شکل۲(الف)و(ب)، ملاحظه می‌نماییم، طیف های عبور (منحنی آبی رنگ) و بازتاب روبه‌جلو و روبه‌عقب (منحنی قرمز رنگ و خط‌چین سبز رنگ) و همچنین تغییرات فاز بر حسب تغییرات بسامد، به ازای یک ساختار دولایه بدست آمده است. به ازای بسامد $\omega=1/491\times10^{13}$ (Hz)، بیشینه مقادیر طیف‌های عبور و بازتاب در محدوده‌ی بسامدی ($1/75\times10^{13}-1/30\times10^{13}$) هرتز مشاهده می‌شود، که این معادل با نقطه‌ی جذب کامل همدوس-لیزری‌شدن($CPA-Laser$) می‌باشد. در همین محدوده‌ی بسامدی، جابه‌جایی جانبی برای طیف‌های عبور و بازتاب محاسبه شده است، که طبق شکل۲(پ)، ملاحظه می‌کنیم هر سه طیف مربوط به جابه‌جایی جانبی، بر یکدیگر منطبق بوده و به ازای نقطه مذکور، کمینه مقدار این جابه‌جایی جانبی بدست آمده است.



شکل۲ : (الف)و(ب)طیف عبور و بازتاب. (پ)جابه‌جایی جانبی. بر حسب تغییرات بسامد و تعیین نقطه جذب کامل همدوس-لیزری شدن.

حال می‌خواهیم به ازای بسامد $\omega=1/491\times10^{13}$ (Hz)، طیف‌های عبور و بازتاب را بر حسب تغییرات زاویه موج فرودی مطالعه نماییم. بدین منظور، مطابق شکل۳(الف)، ملاحظه می‌کنیم که به ازای زوایای نزدیک به $\theta=5^\circ$، بیشینه مقادیر طیف‌های عبور و بازتاب را داریم و در زاویه $\theta=14/5^\circ$، مقدار طیف عبور برابر یک بوده و مقدار طیف بازتاب روبه‌جلو برابر $R_f=2/362\times10^{-8}$، در حالی که طیف بازتاب روبه‌عقب برابر $R_b=4/52$ می‌باشد، که این بیانگر خاصیت نامرئی سازی تک‌سویه در این زاویه می‌باشد. در زاویه $\theta=21/14^\circ$ نیز پدیده مشابهی رخ می‌دهد و این خاصیت وجود دارد، بدین ترتیب که، مقدار طیف های بازتاب روبه‌جلو و عقب فراتر رفته، که به ترتیب برابر $R_f=2/95\times10^{-6}$ و $R_b=14/52$، بوده و طیف عبور همچنان برابر با مقدار یک می‌باشد.

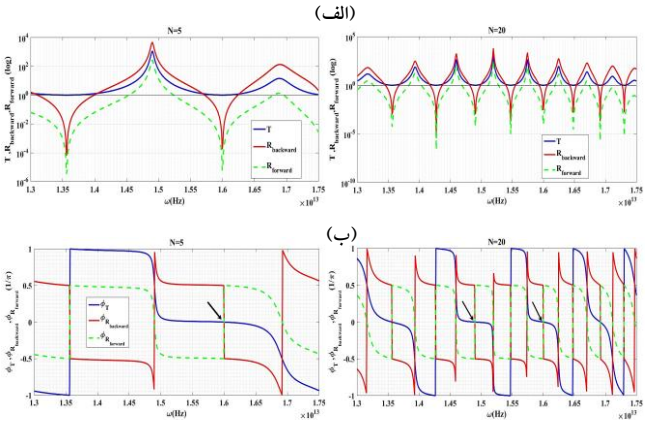


شکل۳ : (الف)طیف عبور و بازتاب. (ب)جابه‌جایی جانبی. برحسب تغییر زاویه.

مطابق شکل۳(ب)، به ازای این زوایای مشخص، پیک‌های مربوط به جابه‌جایی جانبی را ملاحظه می کنیم که وجود دارد و در زاویه $\theta=14/5^\circ$ مقداری منفی و در زاویه $\theta=21/14^\circ$ مقداری مثبت داشته، که این جابه‌جایی جانبی در این دو زاویه، نزدیک به ۱۳۰۰ برابر طول موج نور فرودی می‌باشد. می‌توان نشان داد که، با کاهش زاویه فرود نور به ترتیب از زاویه $\theta=5^\circ$ تا زاویه $\theta=1^\circ$ برای پیک مربوط به بیشینه‌ی جابه‌جایی جانبی به ازای بسامد نور فرودی، یک انتقال به سرخ اتفاق می افتد. مطابق شکل۴(الف)، با افزایش تعداد

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

سلول‌های واحدِ ساختار به مقدار $N=5$ و $N=20$، یک رفتار شبه دوره‌ای را برای طیف‌های عبور و بازتاب خواهیم داشت. با بررسی فازهای مربوط به این طیف‌ها مطابق شکل۴(ب)، در گستره بسامدی در نظر گرفته شده، در نقاط مشخصی که با پیکان نشان داده شده است، برای فازهای بازتاب روبه‌جلو و روبه‌عقب، پرش‌های فازی دقیقاً به مقدار π تؤامان اتفاق افتاده و مقدار فاز مربوط به طیف عبور در این نقاط دقیقاً برابر با مقدار صفر می‌باشد. که این بیانگر پدیده نامرئی‌سازی دوسویه است، که این خاصیت به ندرت در ساختارها اتفاق افتاده، و در حالت دولایه این خاصیت وجود ندارد.



شکل۴ : (الف)طیف عبور و بازتاب برای تعداد سلول واحد $N=5$(سمت چپ) و $N=20$(سمت راست). (ب)فازهای طیف عبور و بازتاب برای تعداد سلول واحد $N=5$(سمت چپ) و $N=20$(سمت راست).

بدین ترتیب، با افزایش تعداد سلول‌های واحد ساختار، تعداد نقاط جذب کامل همدوس-لیزری شدن نیز افزایش می‌یابد و می‌توان نشان داد که، به ازای بسامدهای مشخصی، بیشینه‌ی مثبت و منفی پیک‌های جابه‌جایی جانبی در مقایسه با حالت دولایه، بزرگتر می‌شود.

نتیجه‌گیری

با معرفی ساختاری غیرهرمیتی در یک بُعد و مطالعه پدیده جابه‌جایی جانبی گوس-هانچن، توانستیم خاصیت نامرئی سازی تک‌سویه و دوسویه را تحت شرایط مختلف بدست آورده و نقاط جذب کامل همدوس-لیزری شدن را موقعیت یابی نماییم. همچنین، ویژگی‌های اپتیکی مختلف مربوط به ساختار را مورد بررسی قرار دادیم و ملاحظه کردیم که، تغییر پارامترهای مختلف مربوط به سامانه، نظیر بسامد نور فرودی، زاویه ورود موج به ساختار، تعدّد سلول های واحد و جابه‌جایی جانبی طیف‌ها، هر کدام به صورت جداگانه می‌توانند چه تأثیراتی در جهت بهینه کردن ساختار یک فراماده غیرهرمیتی و طراحی مطلوب‌تر آن‌ها به لحاظ کاربردی و عملی داشته باشند.

مرجع‌ها

[۱] R. El-Ganainy and L. Ge; “Non-Hermitian photonic based on parity-time symmetry”; *Nat. Photonics* **11**(12), (2017) 752-762.
[۲] D. Christodoulides and J. Yang; “*Parity-time symmetry and its applications*”; Springer Nature, Singapore. (2018)
[۳] L. Ge, Y. D. Chong and A. D. Stone; “Conservation relations and anisotropic transmission resonance in one dimensional PT-symmetric photonic heterostructures”; *Phys. Rev. A* **85**(2), (2012) 023802.
[۴] A. Mohammadpour, J. Barvestani and A. S. Vala; “Extraordinary directional optical properties of a parity-time symmetric one-dimensional photonic lattice”; *Opt. Commun*. **500**, (2021) 127342.
[۵] Z. Lin, H. Ramezani, T. Eichelkraut, T. Kottos, H. Cao and D. N. Christodoulides; “Unidirectional invisibility induced by PT-symmetric periodic structures”; *Phys. Rev. Lett*. **106**(21), (2011) 213901.
[۶] W. Wild and C. Giles; “Goos-Hänchen shifts from absorbing media”; *Phys. Rev. A* **25**(4), (1982) 2099-2101.
[۷] S. Longhi; “PT-symmetric laser absorber”; *Phys. Rev. A* **82**(3), (2010).
[۸] F. Goos and H. Hänchen; “Einneuer und fundamentaler Versuch and Totalreflexion”; *Ann. Phys*. **436**(7-8), (1974) 333-346.
[۹] P. Markos and C. M. Soukoulis; “*Wave propagation from electrons to photonic crystals and left-handed materials*”; Princeton Uni. Press. New Jersey (2008) 08540.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

سنتز و مشخصه یابی مواد پروسکایتی هالید سرب شبه دوبعدی

فتحعلیزاده ، نیما[۱و۲] ؛ شجاعی، سعید[۱و۲]؛ احمدی کندجانی، سهراب[۱و۲و۳]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه تبریز

۲پژوهشکده فیزیک کاربردی و ستاره شناسی دانشگاه تبریز، تبریز

۳قطب فوتونیک، دانشگاه تبریز

چکیده.

بدلیل خواص فوق العاده مواد پروسکایتی هالیدی آلی معدنی تحرک پذیری بالای حاملها ، فرآیند ساخت کم هزینه و باند گاف قابل تنظیم، این مواد امروزه مرکز توجه واقع شده اند. از طرفی بهره برداری از این مواد به دلیل پایداری پایین و تجزیه سریع در حضور رطوبت و نور، دارای چالش‌های متعددی است به همین دلیل، مواد پروسکایتی دوبعدی که قابلیت تنظیم پذیری بالاتر و پایداری بیشتر دارند، مورد توجه قرارگرفته اند. در این پژوهش ما ساختارهای دوبعدی پروسکایتی هالید سرب در دو فاز Ruddlesden-Popper(RP) و Dion-Jacobson(DJ) را سنتز و مورد مطالعه قرار داده ایم.

واژه های کلیدی: *پروسکایت، شبه دوبعدی، چاه کوانتومی*

Synthesis and characterization of quasi-2D lead halide perovskite materials

Fathalizadeh, Nima[1,2]; Shojaei, Saeid[1,2]; Ahmadi-Kandjani, Sohrab[1,2]

[1]Faculty of physics, University of Tabriz
[2] Research Institute for Applied Physics & Astronomy, University of Tabriz, Tabriz

Abstract

Perovskite materials attract attention today due to the special properties such as, high carriers mobility, inexpensive manufacturing process and adjustable band gap. On the other hand, the use of these materials has several difficulties due to their low stability and rapid decomposition in humidity and light. For this reason, adjustable and more stable two-dimensional perovskite materials were considered. In this study, we synthesized and studied quasi-2D lead halide perovskite structures in two Ruddlesden-Popper(RP) and Dion-Jacobson(DJ) phases.

***Keywords**: perovskite, quasi two dimensional, quantum well*

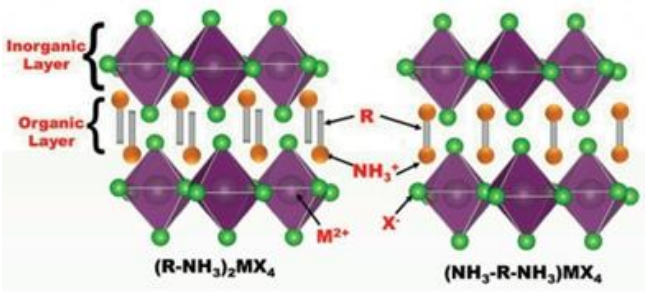
PACS No. 78

مقدمه

مواد پروسکایتی پتانسیل بالایی را برای استفاده در ادوات اپتو الکترونیکی دارا هستند و طی سالهای اخیر مورد توجه بسیاری قرار گرفته اند. در افزاره‌های فتوولتائیک و اپتو الکترونیک مبتنی بر پروسکایت، کیفیت لایه پروسکایت(مورفولوژی، اندازه، یکنواختی، پوشش و...) نقش مهمی درتعیین عملکرد آنها دارد. محققین دراین زمینه پیشرفت سریعی داشته‌اند، که در طول ۶ سال بازدهی سلول‌های خورشیدی را از ۳/۸٪ به ۲۴/۲٪ رساندند. این افزاره‌ها عمدتا شامل فیلم های نازک از مواد پروسکایت هستند که روش‌های متفاوتی مانند لایه نشانی چرخشی، نهشت متوالی و تبخیر حرارتی برای تهیه فیلم های پروسکایت وجود دارند. تلاش برای افزایش بازدهی و پایداری محیطی افزاره مبتنی بر پروسکایت، با سنتز مواد جدید پایدار و طراحی بهتر افزاره‌ها همراه بوده است . اخیرا علاقه به توسعه مواد پروسکایتی در ابعاد پایین افزایش یافته

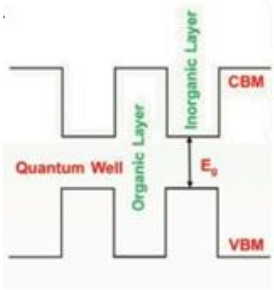
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

است. کاهش ابعاد پروسکایت سه بعدی منجربه تشکیل گروه دیگری از این مواد، معروف به پروسکایت های لایه‌ای شده است. ساختار پروسکایت لایه‌ای شامل تعداد نامتناهی ازصفحات دوبعدی از ساختار ABX_3 است که توسط یک لایه جدا شده است[۱]. در پروسکایت هیبریدی آلی معدنی اگر یک کاتیون بزرگ آلی نظیر زنجیره بزرگ کاتیون های آلکیل آمین،که در ساختار هشت وجهی جای نمی‌گیرد، استفاده شود، منجر به تشکیل ساختاردوبعدی لایه ای می‌شود. فرمول عمومی برای این ساختار $R_2A_{n-1}B_nX_{3n+1}$ است، R کاتیون با زنجیره بزرگ مانند PEA(phenylethylammonium) و n نشان دهنده تعداد لایه‌ها است. پروسکایت‌های لایه ای بسته به تعداد لایه ها خواص متفاوتی از خود نشان می دهند، به طوریکه $n= \infty$ ساختار سه بعدی و $n \square 1$ ساختار دوبعدی را توصیف می‌کند. سایر n ها ساختارهای شبه دوبعدی نام دارند. پروسکایت‌های دو بعدی توسط رودلزدن و پوپر درسال ۱۹۵۷ کشف شدند[۲]. لایه آلی بسته به نوع کاتیون آمونیوم می‌تواند از یک یا دو لایه آلی تشکیل شود. دو گروه اصلی مطابق شکل ۱ $(NH_3\text{-}R\text{-}NH_3)MX_4$ و $(R\text{-}NH_3)_2MX_4$ هستند. کاتیون‌های مونوآمین به عنوان فاز Ruddlesden-Popper(RP) و کاتیون دوآمینه به عنوان فاز Dion-Jacobson(DJ) شناخته شده‌اند.



شکل ۱. ساختار پروسکایت لایه ای دوبعدی با کاتیون مونو و دی آمین [۳]

این لایه های متناوب منجر به خواص جالبی برای پروسکایت‌های دوبعدی می‌شوند. یکی از این ویژگی‌ها اثرمحدودیت دی الکتریکی است، که ناشی از تغییر دوره ای ثابت دی الکتریک کوچک لایه آلی و ثابت دی الکتریک بزرگ لایه معدنی است. همچنین باند گاف لایه آلی بزرگ تر از لایه معدنی می‌باشد. این ویژگی همانطور که در شکل ۲ نشان داده شده است منجر به یک ساختار چاه کوانتومی می‌شود که در آن لایه های آلی به عنوان سد و لایه های معدنی به عنوان چاه عمل می‌کنند[۳].



شکل ۲. ساختار الکترونیکی پروسکایت لایه ای دوبعدی[۳]

به طور کلی از مزایای ساختار دوبعدی در مقایسه با ساختار سه بعدی می توان به مورفولوژی خوب سطح برای رسیدن به حداقل نقص، انرژی پیوند بزرگ برای جلوگیری از جدایی آسان اکسایتون و پایداری بالا اشاره کرد. بهره برداری از مواد پروسکایتی به دلیل پایداری پایین و تجزیه سریع در حضور رطوبت و نور، دارای چالش‌های متعددی است به همین دلیل، مواد پروسکایتی دوبعدی که قابلیت تنظیم پذیری بالاتر و پایداری بیشتر دارند، مورد توجه قرارگرفته اند. در کارحاضر ما به سنتز و مشخصه یابی ساختارهای دوبعدی و شبه دوبعدی برای دوفاز RP و DJ پرداخته ایم.

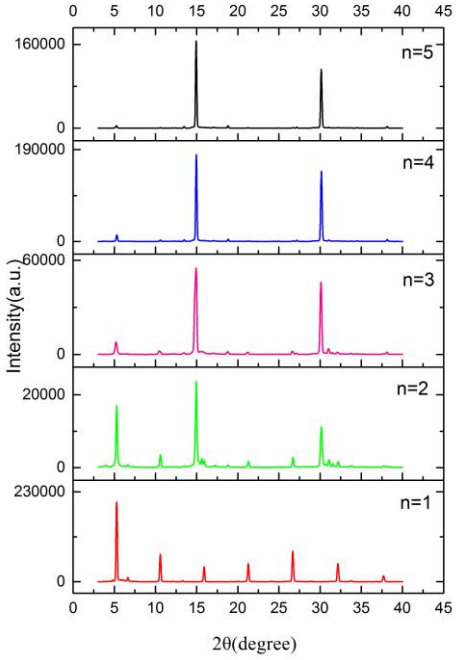
روش آزمایش

برای سنتز مواد پروسکایتی ابتدا نمک CH_3NH_3Br سنتز می شود. برای این کار متیل آمین(MA) و هیدروبرومیک اسید(HBr) به مدت ۲ ساعت در حمام یخ هم زده می شوند، سپس محلول آماده شده طی مراحلی برای حذف حلال خشک شده و در نهایت با دی اتیل اتر شست وشو داده شده و مجدد خشک می شود تاپودر نمک MABr تهیه شود. به طور مشابه نمک های بنزیل آمونیوم برمید($BABr_2$) و پروپان دیامین برمید(PDABr) نیز تهیه می شود. برای سنتز پروسکایت فاز RP نمک های MABr و$BABr_2$ با نسبت های مولی مختلف با $PbBr_2$ جهت تشکیل ساختارهای دوبعدی و شبه دوبعدی در حلال DMF حل می شوند.برای پروسکایت فاز DJ نیز نمک های MABr و PDABr با نسبت های مولی مختلف با $PbBr_2$ در حلال DMF هم زده می شوند تا ساختارهای مورد نظر تشکیل شوند.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

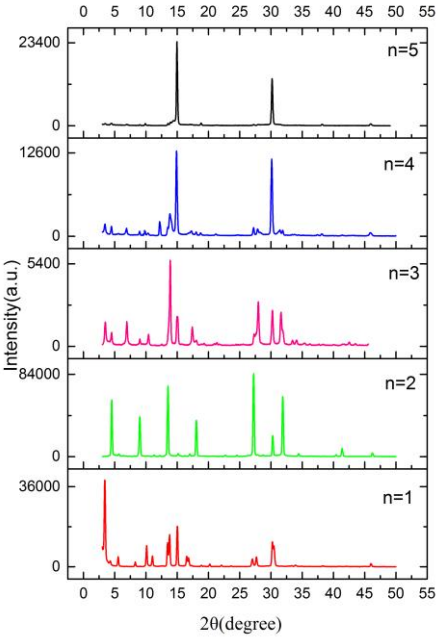
نتایج و بحث

برای تعیین فاز و ساختار بلورین مواد سنتز شده از پراش اشعه ایکس (XRD) استفاده شد. همانطور که در شکل ۳ نشان داده شده است برای فاز RP پروسکایت $BA_2MA_{n-1}Pb_nBr_{3n+1}$ با افزایش n، هیچ پیک پراشی مربوط به مرز دانه های پروسکایت دیده نمی شود که این امر نشان می دهد لایه ها توسط کاتیون بنزیل آمینیوم در سطح مرزها به صورت خودسازمان یافته تشکیل شده اند. دو قله پراش ۱۴.۹ و ۳۰.۲ مربوط به فازهای (۱۱۰) و (۲۲۰) ساختار کپه ای پروسکایت است.



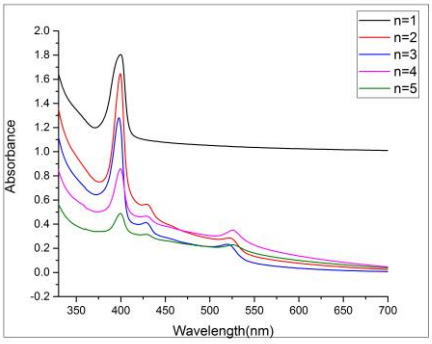
شکل ۳. پراش اشعه ایکس ساختار $BA_2MA_{n-1}Pb_nBr_{3n+1}$

پراش اشعه ایکس برای فاز DJ پروسکایت $(PDA)MA_{n-1}Pb_nBr_{3n+1}$ در شکل ۴ نشان داده شده است. قله ۳.۴ مربوط به تشکیل لایه n=1 است که با افزایش غلظت MA، برای ساختارهای شبه دوبعدی شدت این پیک کاهش یافته است. همچنین با افزایش n پهنای قله ها کاهش یافته است که نشان دهنده افزایش اندازه بلورها است.



شکل ۴. پراش اشعه ایکس ساختار $(PDA)MA_{n-1}Pb_nBr_{3n+1}$

طیف جذب برای ساختار فاز RP در شکل ۵ مشاهده می شود. پروسکایت فاز RP قله جذب اکسایتون قوی در ۳۹۸ نانومتر برای ساختار تک لایه ای ازخود نشان می دهد که این پیک با افزایش n به سمت طول موج های بلندتر جابجاشده و شدت آن کاهش یافته است که نشان دهنده افزایش تعدا لایه های معدنی است. از طرفی ساختار کپه ای $MAPbBr_3$ جذب در طول موج ۵۳۰ نانومتر دارد.

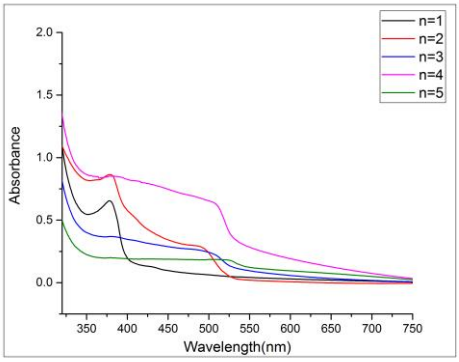


شکل۵. طیف جذب ساختار RP

و برای ساختار شبه دوبعدی قله های جذب بین این دو طول موج است. برای ساختار DJ شکل۶ قله جذب اکسایتون در طول موج ۳۷۸ نانومتر دیده می شود که مربوط به ساختار تک لایه n=1 است. با افزایش n برای ساختارهای شبه دوبعدی شدت این قله کمترمی شود. همانطور که مشاهده می شود برای n=5 فقط شانه ای در طول موج ۵۲۷ نانومتر دیده می شود که مربوط به فاز کپه ای ساختار

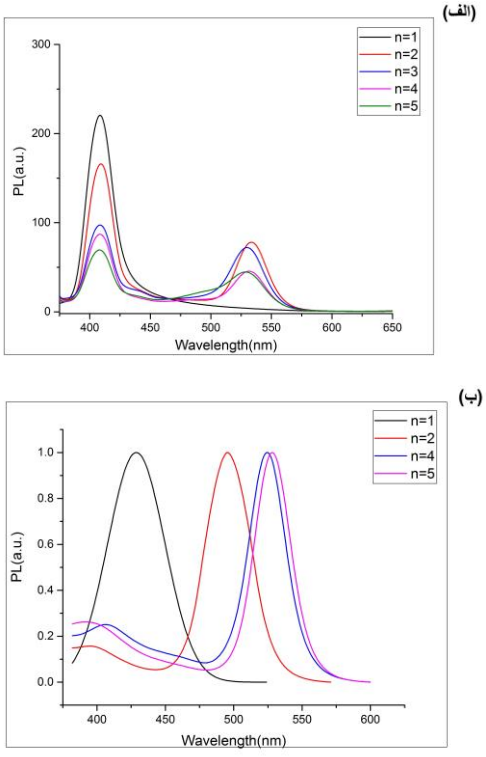
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

است. شدت قله جذب اکسایتون ساختارهای DJ درمقایسه با فاز RP کمتراست. دلیل این امر این است که در ساختار DJ به دلیل پیوند هیدروژنی بین کاتیون دی آمونیوم و پروسکایت از هر دو طرف و طول زنجیره کوتاه تر، لایه های پروسکایت کمتر دچاراعوجاج شده که منجربه خلوص فازی بالاتراین ساختارها می شود. ازهمین روساختارهای فاز DJ پایداری بیشتری دارند[۴].



شکل۶. طیف جذب ساختار DJ

مطابق شکل۷ هردو ساختار طیف فوتولومینسانس خوبی از خود نشان داده اند. برای ساختارهای شبه دوبعدی قله فوتولومینسانس به سمت طول موج های بلندتر جابجا شده است که در تطابق با نتایج قبلی است.



شکل۷. طیف PL الف)فازRP، ب)فاز DJ

نتیجه گیری

مواد پروسکایتی دوبعدی و شبه دوبعدی به دلیل تغییر نسبت ترکیبات دوبعدی به سه بعدی خواص متفاوتی را از خود نشان می دهند که با تغییر این نسبت ها می توان باند گاف این مواد برای طول موج های مختلف را تنظیم کرد که در کاربردهای گوناگونی نظیر دیودهای نور گسیل،سلول های خورشیدی و لیزر استفاده کرد. از طرفی می توان با انتخاب کاتیون با طول زنجیره کوتاه تر به مواد پروسکایتی دوبعدی پایدارتری دست یافت.دراین پژوهش ساختارهای دوبعدی هالید سرب درفازهای RP , DJ سنتز شده و با استفاده از پراش اشعه X و طیف های جذبی و فوتولومینسانس مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که مواد دوبعدی با n=1,2,3,4,5 با موفقیت سنتز شده اند. قله جذب برای ساختار دو بعدی فازهای RPو DJ به ترتیب در ۳۹۸و۳۸۷ اتفاق افتاده و با افزایش n به طول موجهای بلندتر جابجا می شود. برای طیف های PL نیز برای ساختارهای دوبعدی RP و DJ قله ها به ترتیب در ۴۰۸ و ۴۲۸ نانومتر قرار دارند و با افزایش n به سمت طول موج های بلند تر که مربوز به طیف PL ساختار کپه ای است جابجا می شوند

مرجع‌ها

[۱] G. Grancini and M. K. Nazeeruddin, "Dimensional tailoring of hybrid perovskites for photovoltaics," *Nature Reviews Materials*, vol. 4, pp. 4-22, 2019.

[۲] B. Beznosikov and K. Aleksandrov, "Perovskite-like crystals of the Ruddlesden-Popper series," *Crystallography Reports*, vol. 45, pp. 792-798, 2000.

[۳] A. Krishna, S. Gottis, M. K. Nazeeruddin, and F. Sauvage, "Mixed Dimensional 2D/3D Hybrid Perovskite Absorbers: The Future of Perovskite Solar Cells?," *Advanced Functional Materials*, vol. 29, p. 180648, ۲۰۱۹.

[۴] S. Ahmad, P. Fu, S. Yu, Q. Yang, X. Liu, X. Wang, *et al.*, "Dion-Jacobson Phase 2D Layered Perovskites for Solar Cells with Ultrahigh Stability," *Joule*, vol. 3, pp. 794-806, 2019.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

شبیه‌سازی پخش هیدروژن در نمونه‌هایی از تنگستن با درصدهای مختلف تهی‌جا با استفاده از دینامیک مولکولی

میرزایی، سید محمد مهدی[۱]؛ علی‌عسگریان، محمد[۱و*]؛ سیدحبشی، میرمحمدرضا[۲]

[۱] **دانشکده‌ی فیزیک دانشگاه اصفهان، خیابان هزار جریب، اصفهان**

[۲] **پژوهشکده‌ی تحقیقات پلاسما و گداخت هسته‌ای، پژوهشکده‌ی تحقیقات علوم و تکنولوژی هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی، خیابان کارگر شمالی، تهران**

چکیده

یکی از نتایج برهم‌کنش ذرات با انرژی بالا (مانند الکترون‌ها، یون‌ها و نوترون‌ها) با مواد، تشکیل نقص‌های شبکه‌ای است که از انتقال انرژی به اتم‌ها نتیجه می‌شود. تنگستن(W) بواسطه‌ی مشخص‌های گرمایی خوب آن و فرسایش پراکنش پایین، جدی‌ترین گزینه در بین مواد مواجهه شونده با پلاسما (PFM) برای نسل بعدی راکتورهای گداخت می‌باشد. به مانند یک ماده‌ی مواجهه شونده با پلاسما، تنگستن نیز در معرض بمباران شارهای قوی یون‌های ایزوتوپ هیدروژن قرار دارد. در این تحقیق، از کد لمپس برای بررسی MSD و پخش هیدروژن در نمونه‌های تنگستن با درصدهای مختلف تهی‌جا و در دماهای مختلف استفاده می‌شود و نتایج نشان می‌دهد که پخش هیدروژن در نمونه‌ی تنگستن با ۰/۵٪ تهی‌جا بیشتر از یک نمونه‌ی تنگستن معمولی است. علاوه‌براین، پخش هیدروژن در یک نمونه‌ی تنگستن با ۱٪ تهی‌جا بیشتر از تنگستنی با ۰/۵٪ تهی‌جا می‌باشد، با ذکر این نکته که در دماهای پایین‌تر، اختلاف مقادیر پخش در بین نمونه‌های مختلف تنگستن با درصدهای مختلف تهی‌جا به طور قابل توجهی بیشتر از مقادیر پخش در دماهای بالا است که نشان دهنده‌ی این است که در مساله‌ی پخش دما نقش مهمی ایفا می‌کند.

واژه های کلیدی: *تنگستن، پخش هیدروژن، تراکم تهی‌جا، کد لمپس*

Simulation of hydrogen diffusion in tungsten samples with different concentrations of vacancy by molecular dynamics

Mirzaei, Sayed Mohammad Mahdi [1]; Ali Asgarian, Mohammad [1*]; Seyedhabashi Mir Mohammad Reza [2]

[1] Faculty of Physics, University of Isfahan, Isfahan 81746-73441, Iran
[2] Nuclear Plasma and Fusion Research Institute, Nuclear Science and Technology Research Institute, Atomic Energy Organization of Iran, Karegar Shomali Street, Tehran, Iran
[*] Email: m.aliasgarian@ast.ui.ac.ir

Abstract

One of the main results of the interaction of high energy particles (such as electrons, ions and neutrons) with materials is the formation of lattice defects that is consequence of energy transfer to the atoms. Tungsten (W), due to its good thermal properties and low sputtering erosion, is the most serious choice among plasma facing materials for the next generation of fusion reactors. As a PFM, W will suffer the bombardment of high fluxes of hydrogen (H) isotope ions. In this research, LAMMPS code is used to investigating MSD and diffusion of H in tungsten with different concentrations of vacancy in a range of temperatures and results show that diffusion of H in tungsten sample with 0.5% vacancy is more than a perfect tungsten. In addition, the diffusion of H in tungsten sample with 1% vacancy is more than the sample with 0.5% vacancy, but it is noticeable that in lower temperatures, the diffusion difference among tungsten samples with different concentrations of vacancy is greatly more than the values in upper temperatures, shows that temperature plays an important role in diffusion issue.
***Keywords**: tungsten, diffusion of hydrogen, vacancy concentration, LAMMPS code*

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مقدمه

یکی از جدی‌ترین مشکلاتی که در مسیر رسیدن به یک توان گداخت اقتصادی و به صرفه با آن مواجه می‌شویم، برهم‌کنش پلاسما با دیواره‌ی توکامک است که متعاقباً باعث مشکلات بعدی می‌شود. یکی از نتایج برهم‌کنش ذرات با انرژی بالا (الکترون‌ها، یون‌ها، نوترون‌ها) با مواد، تشکیل نقص‌های شبکه‌ای در نتیجه‌ی انتقال انرژی به اتم‌ها می‌باشد. نقص‌های ساختاری می‌توانند شکل های زیادی به خود بگیرند. در یک بلور، شناسایی اتمی که از موقعیت شبکه‌ای اولیه بیرون انداخته شده است آسان می‌باشد، زیرا یک جای خالی(حفره) و یک اتم در موقعیت بینابینی بر جای می‌ماند[۱]. البته نقص‌های بلوری تشکیل شده در شبکه، از نظر ساختاری می‌توانند از این هم خیلی پیچیده‌تر باشند[۲]. برای نمونه آنها می‌توانند نقص‌های ساختاری خوشه‌ای[۳]، نواحی بدون شکل و غیره را تشکیل دهند. تنگستن(W) به‌واسطه‌ی شاخصه‌های گرمایی خوب و فرسایش اسپاترینگ پایین آن، جدی‌ترین گزینه در بین مواد مواجهه شونده با پلاسما (PFM)[1] برای نسل بعدی دستگاه‌های گداخت از جمله ایتر و دمو[٤] می‌باشد، برای مثال رسانش گرمایی و دمای ذوب خیلی بالایی دارد. به مانند یک PFM (ماده‌ی مواجهه شونده با پلاسما)، تنگستن می‌تواند در معرض آسیب شارهای قوی یون‌های ایزوتوپ هیدروژن(H) بمباران کننده قرار داشته باشد. اتم‌های هیدروژن که سبک‌ترین عنصر هستند، می‌توانند به راحتی داخل حجم نفوذ کنند و به‌صورت نقصان‌های ساختاری نقطه‌ای تجمع کنند و عامل بادکردگی‌های سطحی روی تنگستن شوند. مشاهدات آزمایشگاهی اثبات می‌کند که ضخامت رویه‌ی هر بادکردگی(تاول) چندین مرتبه بزرگتر از گستره‌ی تعریف شده برای اتم‌های هیدروژن است[۵] که گواه این موضوع است که اتم‌های هیدروژن در تنگستن تحرک خیلی بالایی دارند. ضمناً القای اتم‌های هیدروژن می‌تواند باعث آسیب‌های میکروسکوپی مانند جابجایی‌ها یا تهی‌جاها[2] شود[٤ و ٦]. تغییر ساختار میکروسکوپی تنگستن بطور قطعی می‌تواند باعث تغییر در ویژگی‌های ماکروسکوپی مکانیکی و گرمایی آن شود و ایمنی این عنصر را در مواجهه با پلاسما به چالش بکشد[۷]. در این تحقیق، ساختار اتمی ماده با استفاده از نرم‌افزار لمپس[3] بررسی شده است که بر پایه‌ی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی استوار می‌باشد. در قسمت اول روش کار، شامل نمونه‌های استفاده شده در شبیه‌سازی، جداول و نمودارهای مربوط به MSD[4] و پخش هیدروژن در نمونه‌های تنگستن برای دماهای مختلف بررسی شده است و در قسمت بعدی نتایج بررسی شده و نتیجه‌گیری می‌شود.

روش ها / محاسبات /معادلات حاکم

به منظور مطالعه‌ی رفتار پخش هیدروژن در تنگستن، کد دینامیک مولکولی لمپس مورد استفاده قرار گرفته است. ابعاد جعبه‌ی شبیه‌سازی به صورت ۱۰*۱۰*۱۰ و شامل ۲۰۰۰ اتم تنگستن با ساختار بلوری bcc و همین‌طور یک اتم هیدروژن منفرد که ابتدای کار در یک تهی‌جا قرار داده شده می‌باشد. شرایط مرزی دوره‌ای در هر سه جهت اعمال شده‌اند. میانگین مربع جابجایی(MSD) را می‌توان به صورت زیر محاسبه کرد

$$\mathrm{MSD}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}[r_i(t)-r_i(0)]^2 \qquad (1)$$

که در آن t زمان پخش(در اینجا ۵۰ پیکوثانیه)، r موقعیت اتم‌های تنگستن، i نمایه‌ی اتم‌ها و n تعداد اتم‌ها می‌باشد.

با استفاده از معادله‌ی انیشتین در نظریه‌ی پیاده روی تصادفی، آنالیز داده‌ای پخش هیدروژن در تنگستن به صورت زیر محاسبه می‌شود

$$\mathrm{D}=\frac{1}{6}\lim_{t\to\infty}\frac{d}{dt}(\mathrm{MSD})=\frac{\langle[r(t)-r(0)]^2\rangle}{6t} \qquad (2)$$

که D پخش هیدروژن در تنگستن می‌باشد[۸].

بحث

دمای سیستم در محدوده دمایی بین ۳۰۰ کلوین تا ۱۸۰۰ کلوین در نظر گرفته شده و زمان پخش هیدروژن در تنگستن ۵۰ پیکوثانیه در هر دما در نظر گرفته شده است. جداول ۱ و ۲، MSD شبیه‌سازی شده و مقادیر پخش را برای هر دما نشان می‌دهند.

1 Plasma Facing Material
2 vacancy
3 Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS)
4 Mean Square Displacement

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

جدول۱: مقدارMSD هیدروژن در یک نمونه تنگستن خالص(یکی از اتم‌های تنگستن با یک اتم هیدروژن جایگزین شده) در مدت زمان ۵۰ پیکوثانیه.

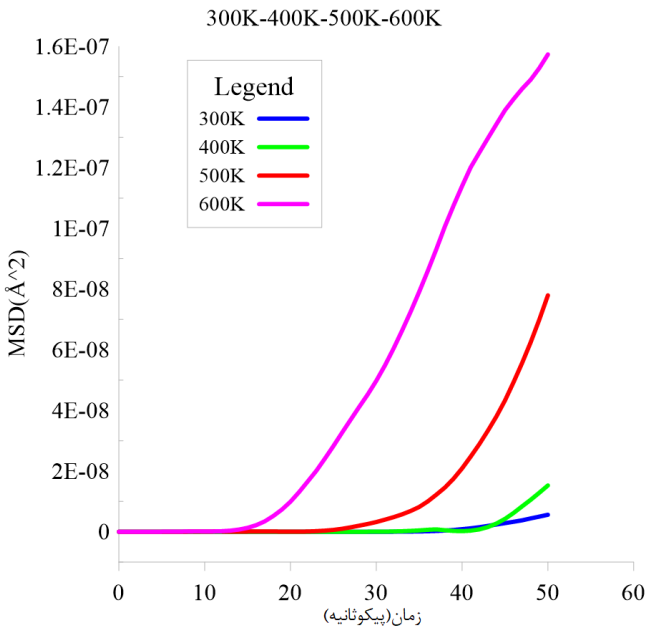
T(k)	MSD(m^2)	T(k)	MSD(m^2)
300	5.60×10^{-29}	1100	1.72×10^{-25}
400	1.52×10^{-28}	1200	1.74×10^{-25}
500	7.79×10^{-28}	1300	2.87×10^{-25}
600	1.57×10^{-27}	1400	3.05×10^{-25}
700	1.01×10^{-26}	1500	5.27×10^{-25}
800	5.69×10^{-26}	1600	6.03×10^{-25}
900	6.48×10^{-26}	1700	1.23×10^{-24}
1000	7.67×10^{-26}	1800	1.64×10^{-23}

جدول۲: مقدار پخش هیدروژن در یک نمونه تنگستن خالص(یکی از اتم‌های تنگستن با یک اتم هیدروژن جایگزین شده) در مدت زمان ۵۰ پیکوثانیه.

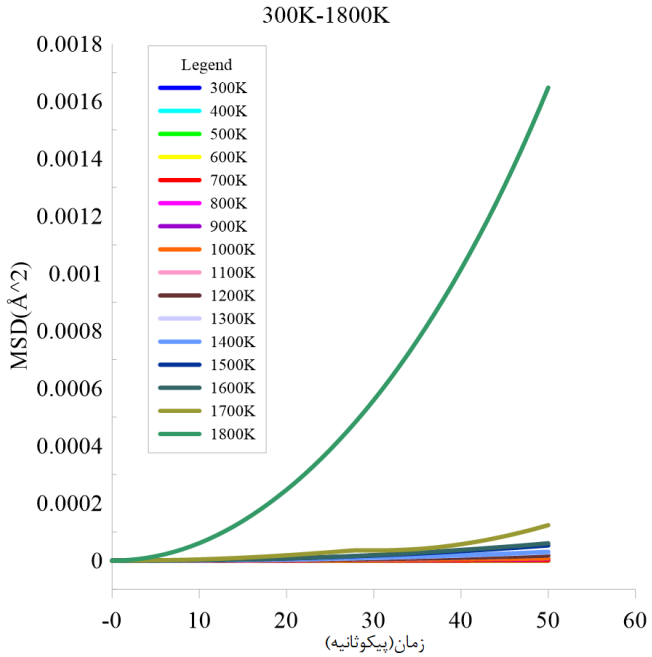
T(k)	D(m^2/s)	T(k)	D(m^2/s)
300	1.86×10^{-19}	1100	5.73×10^{-16}
400	5.06×10^{-19}	1200	5.80×10^{-16}
500	2.59×10^{-18}	1300	9.56×10^{-16}
600	5.23×10^{-18}	1400	1.01×10^{-15}
700	3.36×10^{-17}	1500	1.75×10^{-15}
800	1.89×10^{-16}	1600	2.01×10^{-15}
900	2.16×10^{-16}	1700	4.10×10^{-15}
1000	2.55×10^{-16}	1800	5.46×10^{-14}

اشکال ۱ و ۲ تغییرات MSD را برای هیدروژن در یک نمونه تنگستن خالص در محدوده دمایی ۳۰۰ تا ۶۰۰ کلوین و ۳۰۰ تا ۱۸۰۰ کلوین نشان می‌دهند. همان‌طور که دیده می‌شود، تغییرات MSD هیدروژن در دماهای بالاتر بزرگ‌تر از تغییرات MSD در دماهای پایین‌تر است، که این را می‌توان از شیب تند نمودارها در دماهای بالاتر متوجه شد.

بر اساس بررسی‌ها، بیشینه‌ی dpa[5] در پایان عمر ایتر برای تنگستن ۰/۵۱، ۰/۵٤ و ۰/٤۸ برای اجزای مختلف دیواره و منحرف‌کننده می‌باشد[۹]. بنابراین براساس این مقادیر، در این تحقیق مقدار میانگین این اعداد که حدوداً ۰/۵ می‌باشد انتخاب شده و یک نمونه تنگستن دارای ۰/۵٪ تهی‌جا(۰/۵ dpa) مورد بررسی قرار گرفته است. علاوه بر این، یک نمونه تنگستن با ۱٪ تهی‌جا(۱ dpa) برای یک راکتور فرضی که در معرض چگالی گرمایی بالاتر قرار دارد نیز بررسی شده است.



شکل۱: نمودار خطی MSD برای محدوده دمایی بین ۳۰۰ تا ۶۰۰ کلوین بعد از ۵۰ پیکوثانیه.



شکل۲: نمودار خطی MSD برای محدوده دمایی بین ۳۰۰ تا ۱۸۰۰ کلوین بعد از ۵۰ پیکوثانیه

[5] Displacement Per Atom

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

جدول۳: مقادیر پخش هیدروژن برای یک نمونه با ۰/۵ درصد تهی‌جا(۱۹۹۰ اتم تنگستن با ۱۰ تهی‌جا و ۱۰ اتم تنگستن بینابینی((۰/۵ dpa) برای ۵۰ پیکوثانیه)

T(k)	$D(m^2/s)$	T(k)	$D(m^2/s)$
300	4.26×10^{-14}	1100	1.42×10^{-13}
400	4.60×10^{-14}	1200	1.52×10^{-13}
500	8.03×10^{-14}	1300	1.71×10^{-13}
600	8.63×10^{-14}	1400	1.77×10^{-13}
700	8.86×10^{-14}	1500	1.80×10^{-13}
800	1.20×10^{-13}	1600	2.26×10^{-13}
900	1.33×10^{-13}	1700	2.35×10^{-13}
1000	1.39×10^{-13}	1800	2.85×10^{-13}

جدول٤: مقادیر پخش هیدروژن برای یک نمونه با ۱ درصد تهی‌جا(۱۹۸۰ اتم تنگستن با ۲۰ تهی‌جا و ۲۰ اتم تنگستن بینابینی (۱dpa)) برای ۵۰ پیکوثانیه

T(k)	$D(m^2/s)$	T(k)	$D(m^2/s)$
300	5.33×10^{-14}	1100	2.19×10^{-13}
400	9.30×10^{-14}	1200	2.31×10^{-13}
500	9.66×10^{-14}	1300	3.28×10^{-13}
600	1.46×10^{-13}	1400	3.46×10^{-13}
700	1.61×10^{-13}	1500	3.70×10^{-13}
800	1.80×10^{-13}	1600	4.90×10^{-13}
900	1.99×10^{-13}	1700	5.63×10^{-13}
1000	2.17×10^{-13}	1800	6.20×10^{-13}

با مقایسه و بررسی داده‌های جداول ۳ و ٤ با جدول ۲، نتیجه گرفته می‌شود که تراکم تهی‌جای بیشتر منجر به مقادیر بزرگ‌تر پخش می‌شود و افزایش دما نیز باعث افزایش پخش می‌شود. علاوه براین در دماهای پایین‌تر، اختلاف مقادیر پخش بین تنگستن خالص و تنگستن دارای تهی‌جا، به طور معناداری بزرگ‌تر از مقادیر پخش در دماهای بالاتر است.

نتیجه‌گیری

با توجه به داده‌ها و نمودارها، روشن است که دما و تهی‌جا نقش قابل توجهی را در مقادیرMSD و پخش هیدروژن در تنگستن ایفا می‌کنند. در موردی که یک تنگستن خالص بدون تهی‌جا وجود دارد، افزایش دما باعث یک افزایش در مقادیر MSD و پخش می‌شود. ضمنا یک اختلاف قابل‌توجه در مقادیر پخش هیدروژن در بین نمونه‌های تنگستن(تنگستن خالص و نمونه‌های تنگستن با درصدهای مختلف تهی‌جا) برای دماهای پایین وجود دارد، و این مقادیر از مقادیر مربوط به دماهای بالاتر به‌طور قابل توجهی بزرگ‌تر هستند. براین اساس می‌توان نتیجه گرفت که علاوه بر کاهش دما، جلوگیری از ایجاد تهی‌جا در تنگستن نیز تاثیر قابل توجهی بر کاهش مقدار پخش هیدروژن در تنگستن(که متعاقباً باعث اثرات مخرب بعدی می‌شود) دارد.

مرجع ها

[1] Suzuki, M.S., PHYS. 472/572 *(Solid State Physics)*. 2019.
[2] Stoller, R., 1.11-*primary radiation damage formation. Comprehensive nuclear materials*, 2012: p. 293-332.
[3] Partyka, P., et al., *Grazing incidence diffuse x-ray scattering investigation of the properties of irradiation-induced point defects in silicon.* Physical Review B, 2001. **64**(23): p. 235 .207
[4] Tobita, K., et al., *Design study of fusion DEMO plant at JAERI. Fusion Engineering and Design*, 2006. **81**(8): p. 1151-1158.
[5] Wang, L.M., et al., *Irradiation-induced nanostructures. Materials Science and Engineering*: A, 200 :(1)286 . p72-80.
[6] Hirai, T., K. Ezato, and P. Majerus, ITER *Relevant High Heat Flux Testing on Plasma Facing Surfaces.* MATERIALS TRANSACTIONS, 2005. **46**(3): p. 412-424.
[7] Yu, X., F. Gou, and X. Tian, *Molecular dynamics study of the effect of hydrogen on the mechanical properties of tungsten. Journal of Nuclear Materials*, 2013. **441**(1): p. 324-330.
[8] Li, X.-C., et al., *Molecular dynamics simulation of helium cluster diffusion and bubble formation in bulk tungsten. Journal of Nuclear Materials*, 2014. **455**(1): p. 544-548.
[9] Villari, R., et al., *Nuclear analysis of the ITER full-tungsten divertor. Fusion Engineering and Design*, 2013. **88**(9): p. 2006-2010.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مطالعه ی تغییرات گشتاورلختی و پدیده ی پسخمیدگی ایزوتوپهای 164,166,168,170Hf در اسپین های بالا با استفاده از کد محاسباتی PSM

قاسمیان ، فهیمه ؛ محمدی، سعید

گروه فیزیک ، دانشگاه پیام نور ، مشهد

چکیده

در این مقاله با استفاده از کد محاسباتی PSM به مطالعه تغییرات گشتاور لختی هسته بر حسب بسامد دوران (اثر پسخمیدگی) برای 4 ایزوتوپ زوج-زوج A=164,166,168,170 عنصر هافنیوم پرداخته شده و مقادیر تئوری و تجربی با هم مقایسه شده اند و نتایج بسیار مطلوبی حاصل شده است. از ایزوتوپ 164HFتا 170HF به ترتیب اولین پسخمیدگی در اسپین های 12و12و14 و 18 مشاهده شده است.

واژه های کلیدی: *پس خمیدگی، کد PSM، مدل لایه ای تصویری، باند اوراست، اسپین بالا، ایزوتوپ زوج زوج*

Study of Moment of Inertia changes and Backbendings of 164,166,168,170Hf isotopes at high spins using PSM calculation code

Ghasemian, Fahimeh; Mohammadi, Saeed

Department of Physics, payame Noor University, Mashhad

Abstract

In this article by using PSM code, Changes in the inertial moments in terms of rotational frequency have been studied for 4 even-even A = 164,166,168,170 of the Hafnium isotopes. From 164HF to 170HF isotopes, the first backbending was observed at spins 12, 12, 14 and 18 respectively. Comparison of theoretical and experimental results show acceptable agreements.

***Keywords**:backbending, PSM code, projected shell model, yrast band, High spin, Even-even isotope*

PACS No.20,21,27

مقدمه

در هسته هایی که در محدوده ی خاکهای نادر تغییر شکل دائمی دارند وقتی با یونهای سنگین بمباران میشوند،هسته ی مرکب با اسپین زیاد و انرژی برانگیختگی بالا تشکیل میشود که این تکانه زاویه ای

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

زیادی سیستم علی رغم دفع چند نوترون سبب شکستن پیوندهای نوکلئونی می شود و تغییراتی در چرخش هسته ایجاد می کند بطوریکه درنهایت هسته دستخوش تغییر شکل و پدیده ی پسخمیدگی می شود. هسته با گسیل آبشاری پرتوهای گاما به حالتهای پایینتر اطلاعات مفیدی در خصوص حالت اوراست در اسپینهای بالا در اختیار می گذارد. [1,2] برای توضیح هسته هایی که تغییر شکل منظم و دایمی دارند از مدلهایی استفاده میشود که بتوان اساس و پایه های این تغییرشکل را با آن توضیح داد.کد لایه ای تصویری، PSM در توضیح ویژگی های حالت پایه و حالات نزدیک به اوراست در برانگیختگی های شبه ذره ای در فیزیک اسپین بالا هم برای حالات تغیر شکل نرمال و هم برای حالات فوق تغییر شکل یافته در توصیف رفتار هسته های سنگین بسیار موفق بوده است ؛ میتواند به توصیف کمی طیفها و گذارهای الکترومغناطیسی و بسیاری پدیده ها در اسپین های بالا بپردازد.

در این مقاله با استفاده از کد محاسباتی PSM به بررسی تغییرات گشتاور لختی بر حسب بسامد دوران (پدیده ی پسخمیدگی) برای چهار ایزوتوپ زوج زوج ^{164,166,168,170}Hf، پرداخته شده است و نتایج حاصل از کد PSM با مقادیر تجربی مقایسه گردیده است.

تئوری در چارچوب PSM

کد مدل لایه ای تصویری PSM از مدل نیلسون برای تولید تک-ذره ی تغییرشکل یافته استفاده کرده [5] و به روی یک میدان میانگین تغیرشکل یافته بنا می شود که شامل اثرات جفت شدگی از طریق تبدیل بوگولیوبوف به حالتهای شبه ذره در محاسبات BCS است . خلأ تصویر شده ی BCS باند حالت پایه ی غیر اختلالی را در هسته های زوج زوج بدست می دهد در حالیکه باند حالتهای برانگیخته ی غیراختلالی توسط تصویرسازی چندشبه ذره ای بدست می آیند و ترکیب تمام این پیکربندی ها در این سیستم توسط قطری سازی مدل پوسته ای انجام می شود . بنابراین اساس یک تغییر شکل شبه ذره ای بدست آمده از محاسبات NILSSON+BCS میتواند نقطه ی شروعی بر مدلسازی یک چنین سیستم های هسته ای باشد . این موضوع اساس رویکردی هست که مدل لایه ای تصویری دنبال می کند. [3,4]

پیکربندی چندتایی شبه ذره ای multi-qp برا ی حالتهایی تا 6qp در هسته های زوج – زوج در ذیل آمده است:[6]

$$\left\{\begin{array}{c} |\Phi\rangle, a^{\dagger}_{\nu_i}a^{\dagger}_{\nu_j}|\Phi\rangle, a^{\dagger}_{\pi_i}a^{\dagger}_{\pi_j}|\Phi\rangle, a^{\dagger}_{\nu_i}a^{\dagger}_{\nu_j}a^{\dagger}_{\pi_k}a^{\dagger}_{\pi_l}|\Phi\rangle, \\ a^{\dagger}_{\nu_i}a^{\dagger}_{\nu_j}a^{\dagger}_{\nu_k}a^{\dagger}_{\nu_l}|\Phi\rangle, \\ a^{\dagger}_{\pi_i}a^{\dagger}_{\pi_j}a^{\dagger}_{\pi_k}a^{\dagger}_{\pi_l}|\Phi\rangle, a^{\dagger}_{\nu_i}a^{\dagger}_{\nu_j}a^{\dagger}_{\nu_k}a^{\dagger}_{\nu_l}a^{\dagger}_{\nu_m}a^{\dagger}_{\nu_n}|\Phi\rangle, \\ a^{\dagger}_{\pi_i}a^{\dagger}_{\pi_j}a^{\dagger}_{\pi_k}a^{\dagger}_{\pi_l}a^{\dagger}_{\pi_m}a^{\dagger}_{\pi_n}|\Phi\rangle, \\ a^{\dagger}_{\pi_i}a^{\dagger}_{\pi_j}a^{\dagger}_{\nu_k}a^{\dagger}_{\nu_l}a^{\dagger}_{\nu_m}a^{\dagger}_{\nu_n}|\Phi\rangle, a^{\dagger}_{\nu_i}a^{\dagger}_{\nu_j}a^{\dagger}_{\pi_k}a^{\dagger}_{\pi_l}a^{\dagger}_{\pi_m}a^{\dagger}_{\pi_n}|\Phi\rangle \end{array}\right\} \quad (1)$$

عملگرهای $a^{\dagger}_{\nu}a^{\dagger}_{\pi}$ ، عملگرهای خلق(نابودی) شبه-ذره نوترونی و پروتونی هستند که بر حالت خلا $|\Phi\rangle$ اثر می گذارند. تابع موج PSM ترکیبی خطی از حالتهای تصویریست:

$$|\Psi^{\sigma}_{IM}\rangle = \sum f^{\sigma}_{IK_k}\hat{P}^{I}_{MK}|\Phi_k\rangle \quad (2)$$

$\hat{P}^{I}_{MK}$ عملگر تصویری تکانه زاویه ای است که بر روی حالتهای شبه ذره ای $|\Phi_k\rangle$ اثر می کند .

$$\hat{P}^{I}_{MK} = \frac{2I+1}{8\pi^2}\int d\Omega D^{I}_{MK}(\Omega)\hat{R}(\Omega), \quad (3)$$

D^{I}_{MK} تابع D ، $\hat{R}$ عملگر دوران و Ω زوایای اویلر می باشد. از طرفی ضرایب f^{σ}_{IK} با حل معادله شرودینگر $\hat{H}|\Psi_{IM}\rangle = E|\Psi_{IM}\rangle$ و همزمان قطری سازی هامیلتونین در پایه های $\hat{P}^{I}_{MK}|\Phi_k\rangle$ تعیین میشود و در نهایت معادله ویژه مقداری مدل PSM به صورت ذیل به دست می آید:

$$\sum_{K'k'}\left(H^{I}_{Kk,K'k'} - E^{\sigma}_{I}N^{I}_{Kk,K'k'}\right)f^{\sigma}_{IK'_{k'}=0}, \quad (4)$$

$H^{I}_{Kk,K'k'}$ و $N^{I}_{Kk,K'k'}$ عناصر ماتریس تصویری هستند :

$$H^{I}_{Kk,K'k'} = \langle\Phi_k|\hat{H}\hat{P}^{I}_{KK'}|\Phi_{k'}\rangle$$
$$N^{I}_{Kk,K'k'} = \langle\Phi_k|\hat{P}^{I}_{KK'}|\Phi_{k'}\rangle, \quad (5)$$

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

و در آخر ، مقدار انتظاری انرژی برای هامیلتونین به صورت تابعی از اسپین به دست می آید:

$$E(I)=\frac{\langle\Phi_k|\hat{H}\hat{P}^{I}_{KK'}|\Phi_{k'}\rangle}{\langle\Phi_k|\hat{P}^{I}_{KK'}|\Phi_{k'}\rangle}=\frac{H^{I}_{Kk,K'k'}}{N^{I}_{Kk,K'k'}}\ (6)$$

PSM از هامیلتونین با نیروهای جداسازی بهره می گیرد:

$$\hat{H}=\hat{H}_0-\frac{1}{2}\chi_{QQ}\sum_{\mu}\hat{Q}^{\dagger}_{2\mu}\hat{Q}_{2\mu}-G_M\hat{P}^{\dagger}\hat{P}-G_Q\sum_{\mu}\hat{P}^{\dagger}_{2\mu}\hat{P}_{2\mu},\ (7)$$

که $\hat{H}_0$هامیلتونی کروی تک-ذره که شامل یک نیروی اسپین مدار است. جملات دوم ، سوم و چهارم به ترتیب برهم کنش های چهارقطبی-چهارقطبی ، جفت شدگی تک قطبی و جفت شدگی چهارقطبی را نمایش می دهند. عبارت قدرت چهارقطبی-چهارقطبی χ_{QQ} مربوط به تغییرشکل پایه است [3] ، قدرت جفت شدگی تک قطبی G_M که توسط رابطه زیر تعریف میشود ، + برای پروتونها و – برای نوترونها با $G_1=20.12$, و $G_2=13.13$ ثابتهای جفت شدگی هستند.

$$G_M=\left[G_1\pm G_2\frac{(N-Z)}{A}\right]A^{-1}\ \ (8)$$

که در تناظر با کل فضای پیکربندی 3 پوسته ی اصلی نوسانگر هارمونیک، (N = 3, 4, 5) N = 4, 5 ,6 برای نوترون ها (پروتون ها) می باشد . قدرت جفت شدگی چهارقطبی G_Q متناسب با G_M با ثابت تناسب 0.16 فرض میشود. از آنجایی که جفت شدگی کوریولیس در مدل بوهر برای توضیح طیفهای دورانی تجربی بسیار قوی است.

مباحث و نتایج

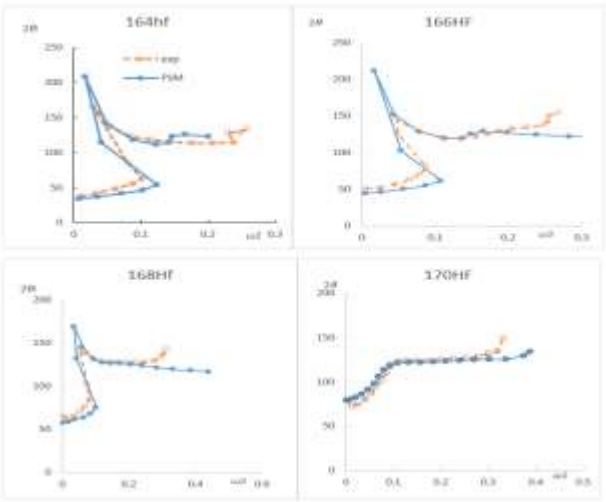
مطالعه ی تغییرات گشتاور لختی برحسب بسامد زاویه ای دوران (نمودار پسخمیدگی)

در محاسبات با کدPSM ، پارامترهای تغییرشکل نیلسون و اسپینهایی که در آن شاهدافزایش ناگهانی گشتاورلختی هستیم، برای 4 ایزوتوپ هافنیوم در جدول 1 آمده است .[8] مشاهده میشود که هر چه به سمت ایزوتوپ سنگین تر پیش میرویم مقادیر I_1 و I_2 بزرگتر میشود.

جدول 1- پارامترهای تغییرشکل نیلسون و اسپین های حاصل از کد PSM برای 4 ایزوتوپ 170 A=164,166,168, عنصر هافنیوم

A	164	166	168	170
ε_2	0.192	0.208	0.233	0.250
ε_4	0.007	0.013	0.020	-0.27
I_1	12	12	14	18
I_2	24	24	28	38

تکانه زاویه ای تحمیلی به سیستم سبب افزایش ناگهانی گشتاور لختی میشود و بسامد دوران کاهش پیدا میکند که به شکل یک عقب رفتگی در نمودار پسخمیدگی قابل مشاهده میباشد. شکل 1 .



شکل 1. نمودارمقایسه ای تئوری و تجربی [7] تغییرات گشتاور لختی بر حسب بسامد دوران برای ایزوتوپهای A=164,166,168,170 هافنیوم.

به این دلیل اختلاف اندکی را در مقادیر تئوری و تجربی شاهد هستیم ، که جفتشدگی کوریولیس در مدل بور برای توضیح طیف‌های

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

چرخشی تجربی هسته‌های خاکی کمیاب با جرم فرد بسیار قوی است [9] و در هسته های زوج زوج نیروی جفتشدگی چهار قطبی قدرت نیروی کوریولیس را تضعیف کرده و مسئول بازتولید صحیح باندهای عبوری در هسته ها می باشد .[10] به همین دلیل تئوری در غیاب این نیرو ، نتایجی اندک متفاوت با نتایج تجربی به ما میدهد .در شکل 1 ، به ترتیب گشتاور لختی برای دو ایزوتوپ 164,166 تا اسپین I=10 و ایزوتوپهای 170, 168 به ترتیب تا اسپین I=12,16 تابعی خطی از اسپین بوده اما از آن به بعد اولین پسخمیدگی به دلیل شکسته شدن یک جفت نوترون از لایه ی $i_{13/2}$ و هم محور شدن آنها با هسته و افزایش ناگهانی گشتارلختی در اسپین های I_1 برای 4 ایزوتوپ مذکور هستیم که میتوان گفت در این حالت گشتاور لختی خیلی تند تر از اسپین افزایش می یابد (مستقل از اسپین افزایش می یابد)که این امر به علت کند شدن حرکت دورانی بوده و درین حالت سرعت زاویه ای با اسپین متناسب میشود و این طیف از نوع دورانی($E = I^2/2\Theta +$ $const$) بوده به دنبال آن کاهش سرعت زاویه ای اتفاق می افتد ، این همان حالتی است که اولین پسخمیدگی رخ میدهد. در واقع اگر ω تابعی از اسپین نباشد ، انرژی های اوراست متساوی المسافت هستند.و طیف انرژی ترجیحا از نوع ارتعاشی هست. $(E = I\omega + const)$ حال اگر این عدم وابستگی به اسپین درمحدوده ی مشخصی از اسپین رخ بدهد، در نمودار پسخمیدگی ، عوض پسخمیدگی شاهد بالاخمش خواهیم بود. دومین تغییرات ناگهانی گشتاور لختی برای 4 ایزوتوپ به شکل بالاخمیدگی در اسپین های I_2 درنمودار پسخمیدگی دیده می شود که به علت شکسته شدن همزمان یک جفت نوترون از لایه ی $i_{13/2}$ و یک جفت پروتون از لایه ی $h_{11/2}$ و تشکیل باند 4qp و هم محور شدن آنها با بدنه هستیم.

نتیجه گیری:

1. تکانه ی تحمیل شده به هسته سبب شکسته شدن پیوند نوکلئونها شده و بعد از شکستگی پیوند نوکلئونها، شبه ذرات برای اینکه با بدنه ی سیستم هم محور شوند گشتاور لختی افزایش می یابد که با کاهش در بسامد دوران هسته همراه است .
2. در ایزوتوپ سبکتر 164Hf ، پسخمیدگی تیز تر دیده میشود و با افزایش عدد جرمی رفته رفته از میزان شدت آن کم شده و در هافنیوم 170 به شکل بالاخمیدگی مشاهده میشود.
3. در ایزوتوپ های سبکتر پسخمیدگی در اسپین های پایین تر رخ می دهد و با افزایش عدد جرمی پسخمیدگی در اسپین های بالا رویت می شود.
4. مقادیر تئوری و تجربی هر 4 نمودار در توافق مطلوبی با هم مشاهده شدند.

منابع

[1] F. S. Stephens and R. S. Simon, Nucl. Phys. A 183, 257 (1972)
[2] P. Ring and P. Schuck, The nuclear many-body problem (Springer Verlag, Berlin, 2004)
[3]K. Hara and Y. Sun, Int. J. Mod. Phys. E 4, 637 (1995)
[4] V Vel´azquez , J G Hirsch and Y Sun, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 25 (1999)
[5] S. G. Nilsson et al., Nucl. Phys. A 131, 1 (1969).
[6]L.-J. Wang, F.-Q. Chen, T. Mizusaki, M. Oi, and Y. Sun, Phys. Rev. C 90, 011303(R) (2014)
[7] CORAL M. BAGLIN, Nuclear Data Sheets 109 (2008) 1103–1382
[8] P. Moller, J. R. Nix, W. D. Myers, and W. J. Swiatecki,
[9] I. Hamamoto, Nucl. Phys. A232 (1974) 445;
K. Hara and S. Kusuno, Nucl. Phys. A245 (1975) 147
[10] S. Iwasaki and K. Hara, Prog. Theor. Phys. 68 (1982) 1782

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

طراحی مفهومی سامانه جستجوگر چشمه گامای مفقودشده مبتنی بر شبکه عصبی مصنوعی

رحیمی، آسیه؛ رحمانی، فائزه

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران

چکیده

با توجه به حوادث هسته‌ای گوناگون ثبت‌شده ناشی از مفقودشدن چشمه‌های رادیوایزوتوپی، در پژوهش پیش رو، با استفاده از شبکه‌ی عصبی مصنوعی، سامانه‌ای هوشمند دارای عملکرد دقیق و سریع، شامل سه آشکارساز سوسوزنی NaI(Tl) به منظور شناسایی موقعیت چشمه‌های رادیوایزوتوپی گاما در محدوده انرژی چند ده keV تا ۳MeV با استفاده از شبیه‌سازی با کد مونت کارلویی MCNPx2.6 طراحی شده است.

واژه های کلیدی: *چشمه‌ی مفقود شده‌ی گاما، جستجوگر هوشمند چشمه گاما، آشکارساز NaI(Tl)، شبکه عصبی مصنوعی، کد MCNPx2.6*

Conceptual design of an orphan radioisotopic gamma source finder based on Artificial Neural Network

Rahimi, Asiyeh; Rahmani, Faezeh

Department of Physics, University of Khajeh Nasir Toosi University of Technology, Tehran

Abstract

According to nuclear incidents reports due to the orphan radioisotope sources, Artificial Neural Networks used to achieve an intelligent system with accurate and fast function, consists of three NaI(Tl) scintillator detector was designed to recognize position of gamma sources with the range of several tents of keV to 3MeV using MCNPx2.6 Monte Carlo Code.

***Keywords**: Orphan Gamma source, Intelligent gamma source finder, NaI(Tl) Scintillator detector, Artificial Neural Networks, MCNPx2.6 Code.*

PACS No. 28

مقدمه

در سال‌های ۲۰۰۰میلادی تا کنون بیش از ۱۲ گزارش مبنی بر تلفات و آسیب فیزیکی افراد به علت گم‌شدن و یا به سرقت رفتن چشمه‌های رادیوایزوتوپی ثبت شده است [۱]. همچنین حادثه‌ی مفقودشدن یک چشمه‌ی ^{192}Ir با اکتیویته‌ی ۱۶,۳ میکروکوری در مراکش، با کشته شدن ۸ نفر و چندین مجروح، پرتلفات‌ترین حادثه‌ی ناشی از مفقودشدن چشمه‌های رادیوایزوتوپی در دهه‌های گذشته، می‌باشد [۲].

بر این اساس، استفاده از سامانه‌ای هوشمند جهت تشخیص سریع موقعیت چشمه‌ی مفقودشده به منظور جلوگیری از خطرات ناشی از پرتوگیری بیش از حد مجاز برای افراد ضروری است. در سال‌های اخیر، انواع مختلفی از سامانه‌های قابلحمل جستجوگر چشمه‌های گاما (چیدمانی از تعداد مختلف آشکارسازهای متفاوت) طراحی شده است. به عنوان نمونه، در سال ۲۰۱٤ سامانه‌ای متشکل از٤ آشکارساز NaI(Tl) دو اینچی طراحی شد [۳] که در این سامانه، اسکن کامل پنج درجه‌ای محیط اطراف و ثبت شمارش سطح زیر قله‌ی طیف پرتوهای گاما در هر مرحله، توسط هر چهار آشکارساز صورت می‌گیرد؛ سپس با استفاده از منطق فازی، موقعیت زاویه‌ای چشمه مفقودشده تعیین می‌گردد. همچنین در سال۲۰۱۵ سامانه‌ای متشکل از یک آشکارساز $LaBr_3:Ce$ و یک حفاظ سربی بر روی یک ربات طراحی شد [٤]. اساس کار این سامانه به صورت پایش محیط و محاسبه‌ی مقدار شمارش کل طیف ثبت‌شده، به منظور شناسایی موقعیت زاویه‌ای چشمه است. همچنین در سال‌های اخیر سامانه‌های پیشرفته‌تری، نظیر سامانه‌های هوابرد، ماشین برد و انواع

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

ربات‌ها طراحی شده‌اند که در مرجع[۵] به این موارد اشاره شده است.

با توجه به پیشرفت فناوری، بهره‌گیری از هوش مصنوعی به‌منظور هوشمندسازی این سامانه‌ها مورد توجه است.

در پژوهش پیش رو، با توجه به طرح ارائه‌شده [٦] و بهره‌گیری از شبکه‌های عصبی مصنوعی، سامانه‌ای هوشمند به منظور شناسایی موقعیت چشمه‌های مفقودشده‌ی گاما در محدوده‌ی انرژی چند ده keV تا ۳MeV با اکتیویته‌های معمولی در محیط‌های بسته آزمایشگاهی طراحی شده است.

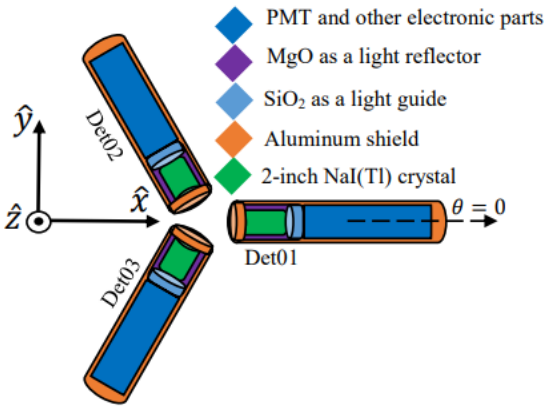
از ویژگی‌های این طرح می‌توان به دقت بالای این سامانه در تعیین موقعیت زاویه‌ای چشمه‌ی مفقودشده، سرعت بالای تشخیص در مقایسه با سامانه‌های متداول و همچنین سبک و ارزان‌بودن آن اشاره کرد.

روش کار

اساس کار انجام شده برای هوشمندسازی سامانه، طراحی ارائه شده در شکل ۱ است [٦] که درآن سه مجموعه آشکارساز NaI(Tl) دواینچی به همراه لوله‌های تکثیرکننده نور و الکترونیک مورد نیاز نشان داده شده است.

مبنای محاسبه‌ی موقعیت زاویه‌ای چشمه‌ی مفقودشده براساس رفتار تغییرات شمارش خالص سطح زیر قله‌ی فوتوپیک در موقعیت‌های مختلف زاویه‌ای قرارگیری چشمه نسبت به آشکارسازها است [٦]. بدین صورت که کل سامانه با اسکن ۳٦۰ درجه‌ای محیط با گام ۳۰ درجه‌ای و بررسی تغییرات شمارش سطح زیر قله‌ی ثبت‌شده در هر یک از موقعیت‌ها برای هر سه آشکارساز، موقعیت زاویه‌ای چشمه مفقود شده را با دقت ۳۰ درجه‌ای یافته و سپس با اسکن ۵ درجه‌ای در این بازه‌ی ۳۰ درجه‌ای و طی مراحل قبل، با حداکثر خطای ۵ درجه‌ای، به موقعیت زاویه‌ای چشمه‌ی مفقودشده دست می‌یابد.

البته فرایند جستجوی موقعیت زاویه‌ای چشمه به این صورت یعنی ثبت سطح زیر قله در ۳٦۰ درجه بسیار زمان‌بر است. برای افزایش دقت و کاهش مدت زمان با استفاده از شبکه‌ی عصبی مصنوعی (جعبه ابزار شبکه عصبی متلب [۷])، لازم است تا سامانه آموزش داده شود، یعنی داده‌های از پیش آماده شده مربوط به قرارگیری چشمه نسبت به آشکارساز در زاویه‌ها و فواصل مختلف تولید شده و در بانک اطلاعاتی قرار گیرند.



شکل ۱ : نحوه‌ی قرارگیری آشکارسازها در طرح‌واره سامانه جستجوگر چشمه‌ی مفقودشده‌ی گاما

پس از آن با آموزش سامانه، موقعیت های مجهول بر اساس رفتار سیستم، نه بر اساس رفتار و پایش گام به گام، قابل شناسایی هستند. داده‌های بانک اطلاعاتی به منظور آموزش با کمک کد مونت‌کارلویی MCNP تولید شده‌اند.

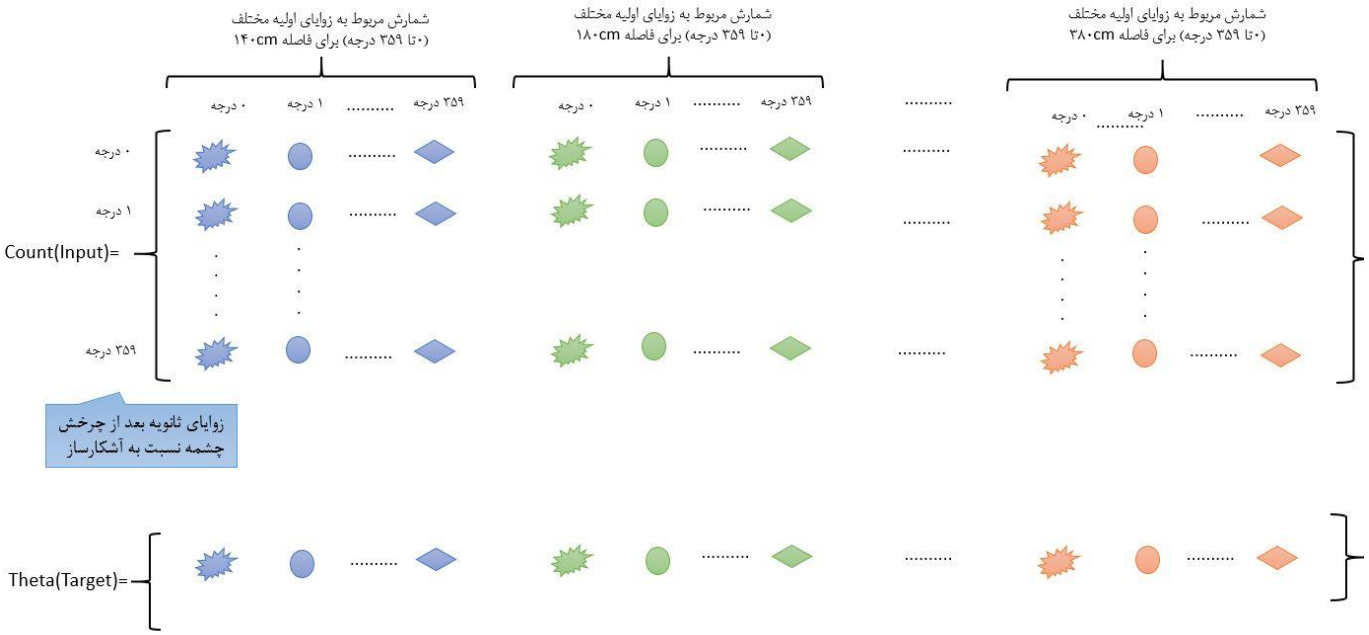
برای تعیین موقعیت زاویه‌ای چشمه (نسبت به محور اصلی آشکارساز اول)، ابتدا با طیف‌نگاری گاما، توسط یکی از آشکارسازها، نوع چشمه‌ی مورد نظر تشخیص داده خواهد شد.

در این پژوهش شمارش سطح زیر قله فوتوپیک ثبت‌شده در هر سه آشکارساز برای چشمه ^{137}Cs در فواصل مختلف از ۱٤۰ تا ۳۸۰ سانتی‌متر (با گام ۲۰ سانتی‌متری) نسبت به مرکز سامانه و نیز در زوایای مختلف با گام زاویه‌ای ۱ درجه‌ای نسبت به محور مرکزی آشکارساز اول ثبت شده است. این داده ها به عنوان داده‌های ورودی و داده‌های آزمون شبکه عصبی در نظر گرفته شده‌اند.

ساخت شبکه‌ی عصبی

انواع مختلفی از شبکه‌های عصبی موجود است که پرکاربردترین شبکه‌ها، شبکه‌های عصبی چند لایه‌ی پرسپترون (Multilayer Perceptron Neural Networks)، پیچشی (Convolutional Neural Networks) و بازگشتی (Recurrent Neural Network) هستند.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



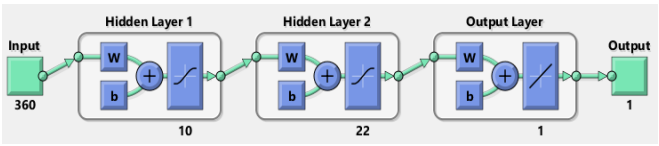
شکل۲ : نحوه‌ی چینش داده‌ها در ماتریس ورودی و هدف در زوایا و فواصل مختلف قرارگیری چشمه نسبت به آشکارساز

با توجه به آنکه داده‌های آموزشی شبکه عصبی، به صورت ماتریس عددی هستند (به صورت سری زمانی نیستند)، شبکه عصبی پیشخور، بهترین انتخاب است.

به منظور آموزش شبکه عصبی، ماتریس ورودی و ماتریس هدف مورد نیاز می‌باشد. مطابق اهداف مسئله، درایه‌های ماتریس ورودی همان شمارش‌های خالص سطح زیر قله در زوایا و فواصل مختلف قرارگیری چشمه نسبت به آشکارساز می‌باشد و ماتریس هدف، زوایای قرارگیری چشمه نسبت به آشکارساز می‌باشد. در شکل۲ نحوه چینش داده‌ها در ماتریس ورودی و هدف آورده شده است.

همانطور که اشاره شد، مبنای شناسایی موقعیت زاویه‌ای چشمه نسبت به آشکارساز بر اساس شناسایی رفتار شمارش سطح زیر قله در موقعیت‌های مختلف زاویه‌ی قرارگیری چشمه نسبت به آشکارساز اول است؛ بنابراین برای ایجاد ماتریس، از هموارسازی تمامی داده‌ها در هر دسته، با انتقال گام ۱ درجه‌ای استفاده شده است.

با استفاده از شبکه عصبی، می‌توان هر تابع پیوسته‌ی چندجمله‌ای را با هر میزان دقت دلخواه، تخمین زد [۸]. برای رسیدن به این هدف، یک شبکه عصبی با دو لایه‌ی پنهان با توابع فعال‌ساز سیگموئید تشکیل شده است. در این شبکه، لازم است لایه‌ی پنهان اول شامل d نورون و لایه‌ی پنهان دوم شامل 2d+2 نورون باشد. در نهایت، مطابق شکل۳ یک شبکه عصبی با دو لایه پنهان ساخته شد؛ لایه‌ی پنهان اول دارای ۱۰نورون و لایه‌ی پنهان دوم دارای ۲۲ نورون با توابع فعالساز سیگموئیدی هستند. در نهایت یک لایه‌ی خروجی با تابع فعالساز خطی قرار داده شد.



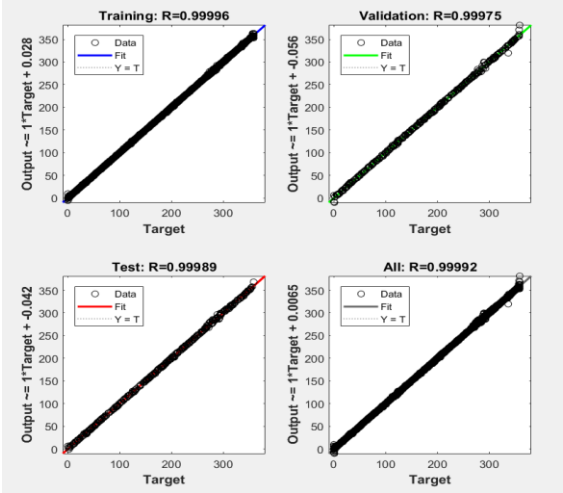
شکل۳ : طرح کلی از شبکه‌ی عصبی ساخته‌شده در محیط متلب

نتیجه‌گیری

مطابق توضیحات بخش قبل، شبکه‌ی عصبی ساخته شد و در مدت زمان تقریبی ۳ دقیقه با دقت بالایی آموزش داده شد.

شکل ٤ نمایش‌دهنده‌ی نمودار رگرسیون شبکه عصبی ساخته شده است.همچنین در جدول۱، مقادیر میانگین خطای خالص خروجی شبکه عصبی ساخته شده، در زوایای مختلف قرارگیری اولیه‌ی چشمه نسبت به آشکارساز از داده‌های آزمون مربوط به فواصل مختلف چشمه نسبت به مرکز سامانه، آورده شده است. طبق این جدول، مقدار میانگین خطای مطلق خروجی کمتر از ۵ درجه می‌باشد و این مقدارخطا، برای سامانه‌ی مدنظر، مناسب می‌باشد.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

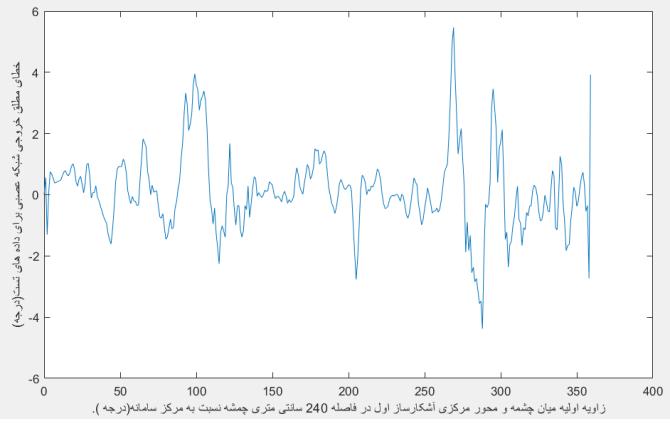


شکل ٤: نمودار رگرسیون شبکه‌ی عصبی ساخته شده

جدول۱: مقادیر میانگین خطای خالص خروجی شبکه عصبی از داده‌های آزمون مربوط به فواصل مختلف چشمه نسبت به مرکز سامانه

فاصله قرارگیری چشمه نسبت به مرکز سامانه آشکارسازی (سانتی‌متر)	مقدار میانگین خطای مطلق خروجی شبکه عصبی برای داده‌های آزمون (درجه)
۱٦۰	۱/٦٥
۲٤۰	۰/۸۸
۲۸۰	۱/۰۱
۳۲۰	۱/۱۸
۳٦۰	۰/۸٤

در ادامه به عنوان نمونه، شکل ۵ نمایش‌دهنده‌ی مقدار خطای مطلق خروجی شبکه عصبی برای داده‌های آزمون مربوط به فاصله ۲٤۰ سانتی‌متری چشمه نسبت به مرکز سامانه می‌باشد.



شکل ۵ : مقدار خطای مطلق خروجی شبکه عصبی برای داده‌های آزمون مربوط به فاصله ۲٤۰ سانتی‌متری چشمه نسبت به مرکز سامانه بر اساس زاویه‌ی اولیه‌ی میان چشمه و محور مرکزی آشکارساز اول

با توجه به مقادیر میانگین خطای خالص در جدول ۱، شکل ۵ و همچنین مقدار سرعت و دقت بالای آموزش این شبکه، به‌کارگیری این ساختار شبکه‌ی عصبی مصنوعی برای هوشمندسازی سامانه‌ی مورد نظر، مناسب می‌باشد.

جمع بندی

با استفاده از آموزش شبکه‌ی عصبی شامل ۲ لایه‌ی پنهان با توابع فعالساز سیگموئیدی که به ترتیب دارای ۱۰ نورون و ۲۲ نورون می‌باشند، هوشمندسازی سامانه‌ی جستجوگر چشمه‌های رادیوایزوتوپی گاما با سرعت و دقت بالایی صورت گرفت، این سامانه‌ی هوشمند قادر است که با میانگین خطای مطلق کمتر از ۵ درجه، موقعیت زاویه‌ای چشمه‌های مفقودشده‌ی گاما در محدوده انرژی چند ده keV تا ۳MeV ، با اکتیویته‌های معمول، در محیط‌های بسته آزمایشگاهی را شناسایی کند. لازم به ذکر است که می‌توان این طرح را به منظور یافتن همزمان انواع چشمه‌های گامای مفقودشده در محیط سه‌بعدی توسعه داد.

مرجع‌ها

[1] data base of radiological incidents and related events, Johnston's archive
www.johnstonsarchive.net/nuclear/radevents/index.html
[2] Casablanca orphaned source; data base of radiological incidents and related events, Johnston's archive
www.johnstonsarchive.net/nuclear/radevents/1984MOR1.html
[3] Willa,M.J. Skutnik, S.E.,& Hall,H. "Detection and positioning of radioactive sources using a four detector response algorithm." *Nuclear instruments and methods in physics Research* section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment,**797**(2014):445-452
[4] Miller, A., Machrafi, R., & Mohany,A"Development of semi-autonomous directional and spectroscopic radiation mobile platform." *Radiation measurements*,**72**(2015):53-59.
[5] Marques,L. Vale,A. & Vaz,P. "State of Art Mobile Radiation Detection Systems for different scenarios." *Sensors*, **21**(2021)
[٦] ع. فرزانه‌پور الوارس و ف. رحمانی؛ »طراحی مفهومی سامانه‌ی جستجوگر چشمه‌ی گامازای نقطه‌ای مفقودشده» ؛ کنفرانس فیزیک ایران، شهریور ۱۳۹۷، دانشگاه بین المللی امام خمینی (ره).
[7] Beale,M.H.,Hagan,M.T.,Demuth,H.B.,1992.*Neural NetworkToolbox™ User's Guide*. R2014aed2014.
[۸] ع. قزلباش، ع. خطیبی و م. شریفی؛ «تخمین شبکه‌های عصبی با تعداد محدود نورون‌ها در لایه‌های مخفی» ؛ گروه آموزشی فنی و مهندسی، دانشگاه جیرفت

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

طراحی آشکارساز حساس به جهت پادنوترینو با استفاده از شبیه‌سازی با ابزار مونت کارلوی جینت ٤

غلامی نژاد ، مرضیه ؛ رحمانی، فائزه

[۲] گروه فیزیک هسته‌ای، دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی ،تهران

چکیده

طیف‌نگاری پادنوترینو به عنوان یکی از روش‌های نوین پایش راکتورها با قابلیت ارزیابی از راه دور بدون دسترسی به قلب راکتور به منظور عدم اشاعه هسته‌ای در سال‌های اخیر به شدت مورد توجه آژانس بین‌المللی انرژی اتمی قرار گرفته است. یکی از روش‌های آشکارسازی این ذره، واکنش بتای معکوس است. برای اطمینان از درستی عملکرد آشکارسازهای پادنوترینوی راکتور، تمایز بین پادنوترینوی راکتور و پادنوترینوی زمینه (پرتوهای کیهانی) ضروری است. از راهکارهای کاهش تپ زمینه، استفاده از پیکربندی حساس به جهت در آشکارساز است. در این مقاله به شبیه‌سازی یک طرح از آشکارساز حساس به جهت پادنوترینو بر اساس ابزار شبیه‌ساز GEANT4 پرداخته شده است که نشان می‌دهد در تمایز بین پادنوترینوهای جهتی از سمت راکتور و پادنوترینوهای کیهانی کارآمد است. این آشکارساز حساس به جهت دارای سه قسمت اصلی شامل یک لایه هدف و دو لایه گیراندازی قطعه‌بندی شده است که به صورت عمود بر زمین قرار خواهند گرفت. از آنجا که پادنوترینوی راکتور عمود بر آرایه آشکارسازی وارد می‌شود، در لایه هدف اندرکنش انجام داده و محصولات اندرکنش متناسب با تکانه پادنوترینو با دو لایه گیراندازی مجاور اندرکنش خواهند داشت. بررسی تپ هم‌فرودی دو ذره بر اساس یک پنجره زمانی مورد تحلیل قرار می‌گیرد. پادنوترینوهای کیهانی با زاویه‌ای به موازات صفحات آشکارساز به آشکارساز برخورد خواهند کرد. بنابراین احتمال ایجاد تپ هم‌فرودی بین دو لایه گیراندازی وجود نخواهد داشت.

واژه های کلیدی: ***آشکارساز جهتی پادنوترینو – پایش قلب راکتور هسته‌ای – اندرکنش بتای معکوس – تپ هم‌فرود – ابزار مونت کارلویی جینت ٤*** .

The design of the directional antineutrino detector using Monte Carlo simulation by Geant4 Tools

Gholaminezhad, Marzieh; Rahmani, Faezeh

Department of Physics, K. N. Toosi University of Technology, Tehran,

Abstract

Antineutrino spectroscopy as a modern method of monitoring reactors with remote evaluation capability without access to the reactor core for Non-proliferation Treaty (NPT) has received much attention from the IAEA (International Atomic Energy Agency) in recent years. One method of detecting this particle is the inverse beta decay (IBD) process. One of the important points in the correct operation of reactor antineutrinos detectors is the distinction between reactor antineutrinos and background antineutrinos from cosmic rays. A design of a directional detector based on the GEANT4 tool has been proposed in this work that shows an acceptable operation in distinction of directional antineutrino from reactor and cosmic rays. There are three main parts in this detector, including a target layer and two capture layers that will be placed perpendicular to the ground. Because the reactor antineutrino enters perpendicular to the detection array, it interacts in the target layer and the interaction products will interact with the two adjacent capture layers in proportion to the antineutrinos momentum. The study of particle signal from IBD is analyzed on the basis of a time window. Cosmic antineutrinos will strike the detector at an angle parallel to the detector plane. Therefore, there is no possibility of creating a coincidence signal caused by neutrons and positrons between the two capture layers.

***Keywords**: Antineutrino Directional Detector – Nuclear Reactor Core Monitoring – Inverse Beta Decay – coincidence signal – GEANT4 Monte Carlo simulation Tool*

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

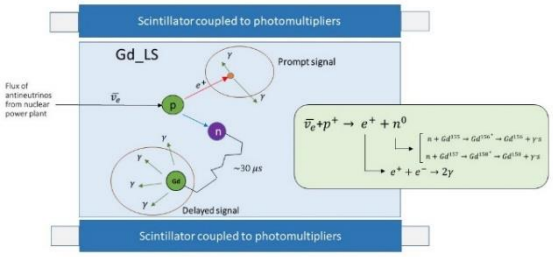
مقدمه

راکتورهای هسته‌ای از مهم‌ترین منابع گسیل پادنوترینوها هستند. یک راکتور هسته‌ای ۱ گیگاواتی تقریبا 10^{20} پادنوترینو در ثانیه گسیل می‌کند [۱] که بیشتر ناشی از شکافت چهار ایزوتوپ سوخت شامل ^{235}U، ^{238}U ، ^{241}Pu و ^{239}Pu است [۲]. بنابراین قلب یک راکتور هسته‌ای (نوع سوخت و غنا) با استفاده از آشکارسازی و اندازه‌گیری پادنوترینوها قابل کنترل و پایش است.

فرایند واپاشی بتا معکوس (IBD[1]): یکی از روش‌های آشکارسازی پادنوترینوها از طریق واپاشی بتا معکوس است:

$$\bar{\nu} + p \rightarrow e^+ + n \ (E_{\bar{\nu}} > 1.8\text{MeV}) \qquad (۱)$$

اندرکنش یک پادنوترینو از طریق نیروی ضعیف با یک پروتون تقریبا آزاد، می‌تواند منجر به تولید یک پوزیترون و یک نوترون شود. در یک آشکارساز مبتنی بر سوسوزن، انرژی پوزیترون از طریق یونش ذخیره می‌شود و در زمان توقف، با یک الکترون نابود شده و دو فوتون گاما ۰/۵۱۱ MeV در جهت خلاف هم تولید می‌کند. انرژی فوتون‌ها نیز به طور غیرمستقیم طی اندرکنش فوتوالکتریک یا کامپتون به محیط منتقل می‌شود. این فرایندها بلافاصله (در چند ns) رخ داده و تپ آنی تولید می‌کند. از سوی دیگر، نوترون انرژی خود را از طریق پراکندگی کشسان از دست داده و در نهایت می‌تواند توسط هسته هیدروژن یا جاذب نوترون که برای افزایش بازدهی جذب نوترون به سوسوزن اضافه شده، گیراندازی شود. این فرآیند، بسته به عامل جذب، محل و غلظت آن در حجم سوسوزن می‌تواند از یک تا صدها میکروثانیه اتفاق بیفتد که تپ تاخیری نامیده می‌شود [۳]. در شکل ۱ طرح‌واره‌ای از واپاشی بتا معکوس نشان داده شده است.



شکل ۱: طرح‌واره‌ای از واپاشی بتای معکوس (IBD) در یک سوسوزن مایع حاوی گادولونیوم.

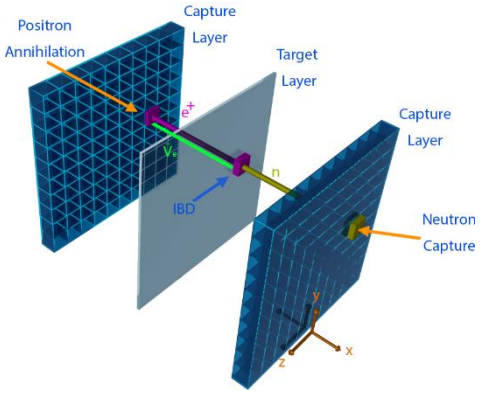
شرح آشکارساز

یکی از مشکلات در آشکارسازهای پادنوترینو، وجود زمینه پادنوترینوی کیهانی است که از پادنوترینوی راکتور قابل تشخیص نیست. یکی از راهکارهای کاهش تپ زمینه، ارائه پیکربندی به منظور افزایش حساسیت جهتی آشکارساز است. در سال ۲۰۱۵ سفدی و همکارش ایده‌ای برای آشکارساز جهتی پادنوترینو ارائه دادند و آن را سانتا[2]نامیدند [٤]. ایده اصلی این آشکارساز مبتنی بر استفاده از سه لایه مجزای آشکارسازی سوسوزن پلاستیک است (شکل ۲). اندرکنش بتای معکوس در لایه مرکزی یا همان لایه هدف رخ داده و دو ذره نوترون و پوزیترون تولید می‌شود. لایه هدف باید آنقدر نازک باشد که نوترون بدون پراکندگی کشسان قادر به فرار از آن باشد. سپس نوترون سریع وارد لایه سوسوزنی مجاور یعنی لایه گیراندازی (حاوی ماده جاذب نوترون حرارتی نظیر بور ۱۰) شده و طی پراکندگی، حرارتی شده و جذب می‌شود. همزمان پوزیترون نیز در خلاف جهت نوترون از لایه هدف خارج شده و در لایه گیراندازی جذب شده و دو گامای ۵۱۱ keV تولید می‌کند. انباشت انرژی همزمان در لایه هدف و لایه‌های گیراندازی مجاور آن، تنها در صورتی امکان‌پذیر است که پادنوترینو در جهت نرمال صفحات آشکارسازی (هدف و گیراندازی) وارد شده باشند. با توجه به جهت فرود پرتوهای کیهانی با نرمال صفحات آشکارسازی، امکان انباشت انرژی ذرات تولیدی در IBD به‌طور همزمان در سه لایه آشکارساز وجود ندارد، بنابراین رخدادهای ناشی از پادنوترینوهای کیهانی در تپ اصلی به راحتی قابل تشخیص بوده و حذف می‌شوند. جهت پادنوترینوی فرودی بر اساس جهت تکانه نوترون و پوزیترون بازسازی می‌شود. جهت تکانه پوزیترون از توزیع فضایی انرژی ذخیره شده، مبتنی بر زمان بازسازی می‌شود. نوترون نیز انرژی خود را از طریق پراکندگی از دست می‌دهد و در لایه گیراندازی توسط یک عامل جاذب گیر می‌افتد. در نهایت موقعیت رویداد IBD براساس تکانه نوترون و پوزیترون بازسازی می‌شود.

1 IBD: Inverse Beta Decay
2 SANTA: segmented antineutrino tomography apparatus

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

لازم به ذکر است این طرح جای دیگری شبیه‌سازی نشده است.



شکل ۲: طرح‌واره‌ای از ایده آشکارساز حساس به جهت

برای پادنوترینو کم‌انرژی، توزیع زاویه ای پوزیترون به صورت رابطه ۲ توصیف می شود که θ زاویه جهت فرود پادنوترینو و پوزیترون است [۵] :

$$\frac{d\sigma}{d\cos\theta} \sim 1 + V_e a(E_v)\cos\theta \quad [۵] \qquad (۲)$$

شبیه‌سازی آشکارساز

در این پروژه از ابزار شبیه‌سازی GEANT4_10_05 برای طراحی آشکارساز جهتی پادنوترینو استفاده شده است.

تعریف هندسه و مواد: سه لایه سوسوزنی به عنوان لایه هدف و لایه‌های گیراندازی در فاصله ۱ متری از یکدیگر در نظر گرفته شدند. لایه‌های گیراندازی به صورت آرایه‌های مکعبی ۱۰×۱۰ از سوسوزن ELJEN EJ-254 حاوی ۵ درصد بور ۱۰ پیکسل‌بندی شده‌اند [٤]. با توجه به انرژی نوترون و پوزیترون ضخامت‌های مختلف بررسی شدند تا ضخامت بهینه بر اساس بیشترین بازدهی انتخاب شود. بر اساس نتایج، ضخامت لایه هدف ۱ cm و ضخامت لایه جذب ٦ cm در نظر گرفته شد.

تعریف چشمه: با توجه به اینکه آهنگ اندرکنش IBD بسیار کم است، ذره اولیه برای ترابرد، پادنوترینو تعریف نشده است، بلکه فرض شده است که پادنوترینو به لایه هدف مرکزی برخورد کرده و فرایند IBD اتفاق افتاده است؛ بنابراین نوترون و پوزیترون، به عنوان ذرات اولیه مد نظر قرار داده خواهند شد. به همین جهت، برای تعریف چشمه لازم است تا نمونه‌برداری در مکان گسیل، زاویه گسیل و انرژی نوترون و پوزیترون ناشی از IBD انجام شود. نمونه-برداری به روش مونت‌کارلو در داخل ابزار جینت با برنامه‌نویسی پیاده‌سازی شده است. با توجه به برخورد تصادفی پادنوترینوها به لایه هدف مرکزی، مکان تولید n و e^+ مبتنی بر نمونه‌برداری یکنواخت از حجم لایه مرکزی تعیین می‌شود. جهت گسیل نوترون همسانگرد در نظر گرفته می‌شود، اما به دلیل رفتار غیر معمول پوزیترون تولیدی از پادنوترینوهای راکتور که کم‌انرژی هستند، برای نمونه‌برداری جهت گسیل پوزیترون، از توزیع زاویه ارائه شده توسط ووگل استفاده می‌شود. محدوده انرژی پادنوترینوهای راکتور MeV ۱۰-۲ است و بیشتر انرژی پادنوترینو به پوزیترون می‌رسد. بنابراین لازم است از انرژی پادنوترینو هم نمونه‌برداری شود. برای نمونه برداری مکان و انرژی از روش مستقیم و برای نمونه برداری زاویه از روش طرد استفاده شد.

فیزیک مسئله: در این شبیه‌سازی برای تعریف فیزیک مسئله از مدل QGSP_BIC_HP در main برنامه استفاده شده است. فرآیندهای فیزیک QGSP_BIC_HP با دقت بالا، برای برهمکنش‌های نوترون کم انرژی (انرژی‌های کمتر از MeV ۲۰) و فرآیندهای الکترومغناطیسی استاندارد برای پرتو γ، پوزیترون و الکترون در شبیه‌سازی استفاده می‌شوند.

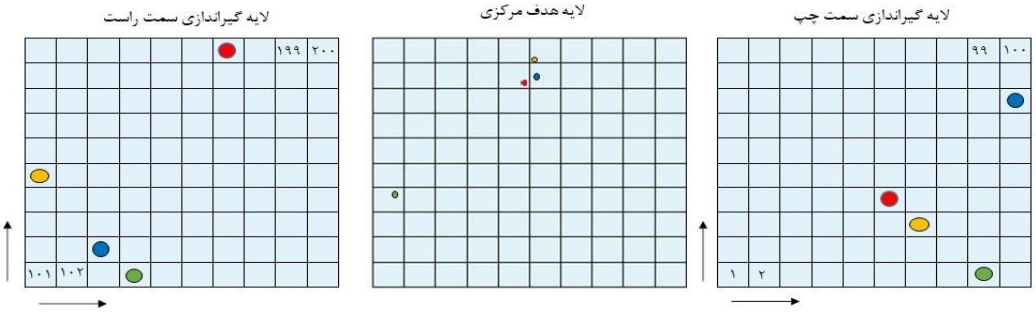
نتایج

در شبیه‌سازی هر کدام از پیکسل‌ها در لایه گیراندازی حساس شده‌اند و به تعداد پیکسل‌ها، فایل خروجی csv ایجاد خواهد شد. با توجه به اینکه پوزیترون و نوترون حاصل از IBD از یک مکان متولد می‌شوند، و با توجه به جدول ۱، ستون‌های پنجم تا هفتم که موقعیت IBD است، هر جفت پوزیترون و نوترون مربوط به یک پادنوترینو مشخص می‌شود. به عنوان مثال در جدول ۱ اطلاعات مربوط به یک جفت پوزیترون و نوترون حاصل از فرایند واپاشی بتا معکوس آورده شده است. همانطور که در جدول ۱ مشاهده می-شود، پوزیترون و نوترونی که از یک موقعیت مکانی متولد شده‌اند و حاصل فرایند واپاشی بتا معکوس است، انباشت انرژی پوزیترون در پیکسل شماره ۱۹۷ (لایه گیراندازی سمت راست) و انباشت انرژی نوترون در پیکسل شماره ۳٦ (لایه گیراندازی سمت چپ) است. زمان مربوط به گیراندازی نوترون μs ۹ با فرایند نابودی زوج

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

جدول ۱: اطلاعات به دست آمده از فایل‌های csv.

فرایند	شماره Ntuple	زمان (ns)	انرژی (MeV)	مولفه x محل وقوع IBD	مولفه y محل وقوع IBD	مولفه z محل وقوع IBD	مولفه x بردار جهت تکانه	مولفه y بردار جهت تکانه	مولفه z بردار جهت تکانه
نابودی زوج	۱۹۷	٤/٥٧٦	۰/۱٥۹	−۰/۲۸۹	۲۲/۹۲٥	−۰/۱٤۷	۰/٦۳۳	−۰/۰٤۹۲	۰/۷۷۲
گیراندازی نوترون	۳٦	۹۲۷۹/۹۷	۰/٤٥٤	−۰/۲۸۹	۲۲/۹۲٥	−۰/۱٤۷	−۰/۳۹۹	−۰/٦۳٦	−۰/٦٥۹



شکل ۳: ثبت انرژی انباشت شده چند جفت پوزیترون و نوترون در پیکسل‌های لایه گیراندازی سمت چپ و راست که اطلاعات مربوط به رنگ قرمز در جدول ۱ آورده شده است.

اختلاف دارد، که این زمان صرف فرایند کند شدن نوترون و تبدیل آن به نوترون حرارتی و در نهایت جذب آن شده است. در شکل ۳ انرژی انباشت شده چند جفت پوزیترون و نوترون دیگر در هر پیکسل با رنگ‌های مختلف نشان داده شده است.

نتیجه‌گیری

در این مقاله بررسی عملکرد یک طرح از آشکارسازحساس به جهت پادنوترینو بر اساس ابزار شبیه‌ساز GEANT4 شبیه‌سازی شد. این آشکارساز حساس به جهت دارای سه قسمت اصلی شامل یک لایه هدف و دو لایه گیراندازی قطعه‌بندی شده است که به صورت عمود بر زمین قرار خواهند گرفت. مبنای آشکارساز حساس به جهت بر اساس توزیع زاویه‌ای محصولات اندرکنش بتا معکوس، یعنی پوزیترون و نوترون است. در واقع «رو به عقب بودن پراکندگی پوزیترون» و «روبه جلو بودن پراکندگی نوترون» باعث می‌شود پوزیترون و نوترون در خلاف جهت یکدیگر از لایه هدف مرکزی که محل وقوع IBD است، خارج شوند. انباشت انرژی پوزیترون و نوترون در دو لایه گیراندازی در طرفین لایه هدف، و همچنین موقعیت مکانی که هر کدام از دو ذره نام برده شده، می تواند در آشکارسازی پادنوترینوهای راکتور موثر واقع شود. بررسی تپ هم-فرودی دو ذره بر اساس یک پنجره زمانی مورد بررسی قرار می‌گیرد. با توجه به نتایج حاصل از شبیه‌سازی، طراحی آشکارساز جهتی پاد-نوترینو امکان‌پذیر است، چون با دسترسی به موقعیت IBD در لایه هدف مرکزی و با ثبت موقعیت مکانی و انرژی انباشت شده دو ذره پوزیترون و نوترون، با دقت خوبی زاویه مربوط به دو ذره ثبت می‌شود. در نتیجه با داشتن زاویه، جهت تکانه پوزیترون و نوترون به دست خواهد آمد و در نهایت پادنوترینو راکتور آشکارسازی می-شود.

مرجع‌ها

[۱] Sutanto, F., et al., *SANDD: A directional antineutrino detector with segmented 6Li-doped pulse-shape-sensitive plastic scintillator*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2021. **1006**: p. 165409

[۲] Kandemir, M. and A. Cakir, *Comparison of plastic antineutrino detector designs in the context of near field reactor monitoring.* Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2019. **927**: p. 353-361.

[۳] Kandemir, M. and A. Cakir, *A reactor antineutrino detector based on hexagonal scintillator bars.* Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2020. **953**: p. 163251.

[۴] Safdi, B.R. and B. Suerfu, *Directional antineutrino detection.* Physical review letters, 2015. **114**(7): p. 071802.

[۵] Vogel, P. and J.F. Beacom, *Angular distribution of neutron inverse beta decay, ν e+ p⟶ e++ n.* Physical Review D, 1999. **60**(5): p. 053003.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تحول شکل در ایزوتوپهای اربیوم با $N=86-95$

معظمی، مهناز ؛ کاردان، اعظم

دانشکده فیزیک دانشگاه دامغان، دامغان

چکیده

در این مقاله تحول شکل حالت پایه ایزوتوپ‌های Er با $N = 86 - 95$ با استفاده از روش CNS مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات PES برای مطالعه تحول شکل و تشخیص همزیستی در ایزوتوپ‌های زوج و فرد انجام شد. نمودارهای PES نشان می‌دهد در حالت پایه در برخی از ایزوتوپ‌های Er حالت‌های جمعی و غیر جمعی با یکدیگر رقابت می‌کنند. همچنین نوارهای TSD و ND نیز به ایرست نزدیک می‌شوند. بررسی پارامترهای تغییر شکل نشان می‌دهد با افزایش نوترون پارامتر ε_2 افزایش می‌یابد و پارامتر γ نیز مقادیر متفاوتی به خود می‌گیرد که نشان دهنده تحول شکل در ایزوتوپ‌های Er است.

واژه های کلیدی: *روش نیلسون استروتینسکی کرنک شده، نمودارهای سطوح انرژی پتانسیل، پارامترهای تغییر شکل، تحول شکل*

Shape evolution in Erbium isotopes with $N=86-95$

Moazami, Mahnaz; Kardan, Azam

School of Physics, Damghan University, Damghan, Iran

Abstract

In this paper, the ground- state shape evolution in Er isotopes with N = 86 - 95 have been researched by using CNS method. PES calculations were performed to study shape evolution and detect the coexistence in even and odd Er isotopes. PES diagrams show that the collective and non-collective states compete with each other in the ground state in some Er isotopes. Also, the TSD and ND bands become close to the yrast line. Examination of deformation parameters shows with increasing neutron, the ε_2 parameter increases and the γ parameter takes different values, which indicates the shape evolution in Er isotopes.

Keywords: *Cranked Nilsson-Strutinsky method, PES diagram, deformation parameters, shape evolution.*

PACS No. ۲۱

مقدمه

در فیزیک هسته‌ای، شکل هسته‌ای و تحول آن نقش مهمی در درک پدیده‌های هسته‌ای و توصیف ساختار هسته‌ها ایفا می‌کند. بررسی و مطالعه وجود تحول شکل هسته و تغییر شکل آن به عنوان تابعی از تعداد پروتون‌ها و نوترون‌ها از دیدگاه‌های مختلف، توجه بسیاری از تئوری‌پردازان را به خود جلب کرده است. [۸-۱] بسیاری از هسته‌ها در حالت پایه خود تغییر شکلی با تقارن محوری دارند اما برای بررسی ویژگی‌های گذار دینامیکی و الکترومغناطیس هسته‌ها با در نظر گرفتن یک تغییر شکل که شامل تقارن غیر محوری به ویژه سه محوری $(\gamma \neq 0)$باشد (که در این موقعیت، هسته‌ها در برابر انواع تغییر شکل انعطاف پذیر نرم هستند) لازم می‌باشد. یکی از ویژگی‌های جذاب و محرک سیستم‌های کوانتومی هسته‌ای چند ذره‌ای، توانایی به حداقل رساندن انرژی توسط شکل‌های مختلف پذیرفته شده در انرژی‌ها در قیاس با کل انرژی بستگی هسته‌ای است. [۱] به صورت تجربی نشان داده شده است که هسته‌هایی که پوسته بسته دارند کروی شکل هستند. [۲] تحول شکل حالت پایه هسته اتم یک زمینه تحقیقاتی فعال و جذاب است. [۹] به طور کلی در بررسی ساختار هسته دو روش محاسباتی میکروسکوپی و ماکروسکوپی وجود دارد که هیچ کدام به تنهایی قادر به توصیف دقیق هسته‌ها نبوده‌اند. معروف‌ترین مدل ماکروسکوپی مدل قطره مایع اولین بار در سال ۱۹۳۵ ارائه شد و بعدها برای توصیف نظریه پدیده شکافت هسته‌ای مورد استفاده قرار گرفت. [۱۰] در این تحقیق از مدل *LSD* که توسط پومورسکی و همکارانش در سال ۲۰۰۳ ارائه شد استفاده می‌شود. در کار حاضر

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

از مدل ماکروسکوپی-میکروسکوپی نیلسون- استروتینسکی- کرنک شده با پتانسیل نوسانگر هماهنگ اصلاح شده و با صرف نظر از جفت شدگی (CNS)استفاده می‌کنیم. [۱۱] این مدل یکی از موفق‌ترین مدل ها برای توصیف هسته‌ها در اسپین‌های بالا و خیلی بالا است، هدف ما در این کار توصیف تحول و همزیستی شکل در زنجیره ایزوتوپی $^{154-168}_{68}Er$ در محدوده اعداد نوترونی $86 \le N \le 95$ یعنی ناحیه جرمی متوسط با استفاده از مدل CNS است. اخیراً مطالعاتی در ناحیه جرمی $A \sim 160$ [۹] انجام شده است. در بخش بعدی تئوری استفاده شده ارائه می‌شود و در بخش سوم سطوح انرژی پتانسیل PES، نوارهای دورانی و نحوه قرارگیری این حداقل های انرژی و تاثیر آنها بر ساختار هسته ها مورد بررسی قرار می‌گیرد و همچنین نتایج بدست آمده از این تحقیق ارائه می‌گردد.

بررسی مدل تئوری

در این مطالعه از مدل نیلسون-استروتینسکی کرنک شده جفت نشده برای محاسبه و مطالعه ساختار هسته‌ها و سطوح انرژی پتانسیل هسته‌ای استفاده می‌شود. این روش یک روش میکروسکوپی- ماکروسکوپی است و همین امر آن را به یکی از بهترین و قوی‌ترین مدل‌های هسته‌ای در مطالعه ساختار هسته در مناطق جرمی مختلف تبدیل کرده است.هامیلتونی که نوکلئون‌ها را در هسته‌های در حال دوران در میدان متوسط توصیف می‌کند به صورت زیر است [۱۲],

$$H^{\omega} = H(\varepsilon_2,\gamma,\varepsilon_4) - \omega j_x \qquad (1)$$

$H(\varepsilon_2,\gamma,\varepsilon_4)$ هامیلتونی نوسانگر اصلاح شده را بر حسب $(\varepsilon_2,\gamma,\varepsilon_4)$ به صورت رابطه ۲ مطرح می شود:

$$H(\varepsilon_2,\gamma,\varepsilon_4) = h_{HO}(\varepsilon_2,\gamma) - \kappa\hbar\omega_0[2l_t.s + \mu(l_t^2 - \langle l_t^2\rangle_N)] + V_4(\varepsilon_4,\gamma) \qquad (2)$$

شاخص t در عملگر تکانه زاویه‌ای مداری، آن را در مختصات کششی تعریف می‌کند، پارامترهای μ و κ قدرت جمله است $l_t.s$ و l_t^2 را تعیین می‌نماید. [۱۳] انرژی کل میکروسکوپی با جمع این انرژی‌های تک ذره‌ای بر روی حالت‌های اشغال شده محاسبه می شود، که توسط معادله (۳) به دست می‌آید،

$$E_{sp}(\varepsilon_2,\gamma,\varepsilon_4,I) = \sum_{occ} e_i^{\omega}(\varepsilon_2,\gamma,\varepsilon_4) \qquad (3)$$

انرژی کل با استفاده از روش تصحیح پوسته به دست می‌آید که به صورت مجموع معادله (٤) تعریف می‌شود.

$$E_{tot}(\varepsilon_2,\gamma,\varepsilon_4,I) = E_{LD}(\varepsilon_2,\gamma,\varepsilon_4,I) + E_{sh}(\varepsilon_2,\gamma,\varepsilon_4,I) \qquad (4)$$

و جمله ماکروسکوپی E_{LD}با مدل LSDدر نظر گرفته می‌شود. [١٤] PES با به حداقل رساندن انرژی کل با توجه به پارامترهای ١٦ قطبی محاسبه می‌شود و در صفحه (ε_2,γ) رسم می‌شود.

محاسبات زنجیره ایزوتوپی اربیوم

در این تحقیق هسته اربیوم با عدد پروتونی $Z=68$ و در محدوده عدد نوترونی $N=86-95$ یعنی پنج ایزوتوپ A فرد و پنج ایزوتوپ A زوج بررسی شده است. رفتار هسته‌ها را با توجه به PESهای (سطح انرژی پتانسیل) بدست آمده می‌توان تشخیص داد. در اینجا برای Er به بررسی آنها با افزایش نوترون‌ها پرداخته می‌شود. فاصله خطوط هم پتانسیل در این نمودارها $0.25MeV$ می‌باشد و خطوط γ در فواصل 15° قرار دارند. مناطق آبی تیره کمینه انرژی و موقعیت‌ها با لیبل *، حالت ایرست را نشان می‌دهند. بعد از تغییر شکل چهارقطبی (ε,γ) ،تغییر شکل ١٦قطبی ε_4در درجه اهمیت بعدی قرار دارد. بنابراین انرژی را در یک فضای تغییر شکل سه بعدی $(\varepsilon,\gamma,\varepsilon_4)$در کد استاندارد CNSکمینه می‌کنیم. فضای سه بعدی مش در این محاسبات به صورت زیر می‌باشد:

$$x = 0.00(0.04)0.64$$
$$y = -0.28(0.04)0.32$$
$$\varepsilon_4 = -0.09(0.03)0.09$$

و برای پارامترهای μ و κ مجموعه پارامترهای $A=150$در نظر گرفته می‌شود. مختصات x و y در آن با مختصات (ε,γ) توسط روابط زیر با هم مرتبط می شوند:

$$x = \varepsilon_2\cos(\gamma+30)$$
$$y = \varepsilon_2\sin(\gamma+30)$$

فضای سه بعدی که در محاسبات استفاده شده‌اند 5×256 نقطه برای Erمی‌باشد. که هر نقطه می‌تواند پارامترهای تغییر شکل را برای هامیلتونی رابطه (۱) تعیین کند. حل این هامیلتونی در حالت پایه و پیکربندی‌های کوانتومی $(\pi,\alpha)=(+,+)$ اسپین پاریته حالت پایه هسته‌ها با A فرد $(0.5)^+$ و هسته‌ها با A زوج 0^+ و به ترتیب

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

محدوده اسپینی $I=0-76$ و $I=0.5-76.5$ بدست می‌آید. با استفاده از انرژی پیکربندی نکلئون‌ها PESها ترسیم می‌شوند. برای بررسی خصوصیات و ویژگی‌های یک هسته نیاز به دانستن ویژه توابع و ویژه مقادیر و انرژی کل آن می‌باشد، بنابراین برای هر نقطه مش باید هامیلتونی (CNS)حل شود ومحاسبات مربوط به آن انجام شود.

بحث و نتیجه گیری

در کار حاضر به بررسی اشکال و تحولات شکل هسته Er در محدوده نوترون $(86\le N\le 95)$ با استفاده از روش (CNS) پرداخته شده است. با توجه به محاسبات و بررسی PESها در شکل۱و ترازهای تک ذره برای هسته Er نتایج زیر حاصل شد. از مقایسه ایزوتوپ‌های زوج و فرد هسته Er دیده شد که در ایزوتوپ‌های زوج هم نوار جمعی و هم نوار غیر جمعی در یک زمان در انرژیهای پایین وجود دارند طوری که برای ایرست شدن با هم رقابت می‌کنند. اما در هسته های فرد، در کمینه های تک ذره، این هم زمانی وجود ندارد یا اگر هم دیده می شود در انرژیهای بالا قابل مشاهده است. می توان گفت هسته هایی که پوسته بسته دارند چنین تعاملی را می‌توانند داشته باشند. [۱۵] با توجه به نتایج مربوط به مرجع [۱۶] که تاییدی بر وجود این همزیستی می باشد یعنی نوار پخت را به صورت همزمان به صورت نوار دورانی جمعی و غیرجمعی مشاهده کرده‌اند بیان می‌دارند که این موضوع هم راستایی و هم سو شدن پروتون‌های موجود در نزدیکی سطح فرمی را نشان می‌دهد. این هم راستایی پروتون‌ها ممکن است در گذار شکل یک محرک باشد. اما اینکه نوارهای غیر جمعی به سمت ایرست می‌روند ممکن است فقط با این حقیقت توضیح داده نشود. در این مرجع که $^{158}_{68}Er$ را مورد بررسی قرار داده است مدعی است اگر جفت‌های نوترونی هم مشابه اوربیتالهای پروتونی هم راستا شوند این توصیف می‌تواند کارایی بیشتری داشته باشد. بنابراین همراستایی نوترون‌ها در اوربیتال‌هایی با پاریته منفی $h_{\frac{11}{2}}$ احتمالاً می‌تواند برای تکمیل این مکانیزم گذار کل مهم باشد. البته این دلیل برای اسپین‌های بالا کاربرد دارد و نمی‌تواند توجیهی برای این همزیستی در حالت پایه باشد. همانطور که مشاهده شد با مقایسه PESها درسه ایزوتوپ اول اربیوم $A=154-156$ شکل پخت، در بقیه ایزوتوپ‌ها شکل کشیده برای انرژیهای کمینه قابل مشاهده است. برای این گذار از پخت به کشیده یا برعکس می‌توان دید که در Er آخرین پوسته پنجم در حال پر شدن است. در این حالت ترازهای $high-j$ پوسته ششم $i_{\frac{13}{2}}$ شروع به پر شدن می‌کنند و شکل های کشیده ایجاد می‌شوند. به صورت کلی در این محدوده جرمی می‌توان دید که پوسته پنجم و ششم برای نوترون‌ها فعال می‌شوند. همینطور که دیده شد با توجه به نحوه پر شدن ترازها می‌توان تغییر شکل ایجاد شده در هسته‌ها را کاملاً مشاهده کرد. مشاهدات نشان می‌دهد وقتی نیمه پایینی پوسته در حال پر شدن است شکل پخت و زمانی نیمه بالایی در حال پر شدن است شکل کشیده دیده می‌شود. [۲] با توجه به PESها در $\hbar\omega=0$ حالت پایه می‌توان چند حالت پایان پذیر را مشاهده نمود، که به ترتیب برای نوار دورانی پخت در $^{156}_{68}Er$و بعدی برای نوار دورانی کشیده در $^{160}_{68}Er$ و سپس در $^{162}_{68}Er$اتفاق می‌افتد، این ترازها در حالت پایه ایرست هستند. با توجه به PESها هم می‌توان به این نتیجه رسید که همزمانی نوار TSD و ND وجود دارد یعنی این کمینه‌ها تقریبا هم انرژی هستند و نوار TSD، ایرست می‌باشد تغییرات شکل واضحی را در آنها می‌توان مشاهده کرد. چالشی قابل توجه برای پیش‌بینی رفتار ساختارهای TSD در هسته‌های خاص در این منطقه وجود دارد. [۱۷] حتی ایزوتوپ‌هایی که فقط یک نوکلئون مشترک دارند را موارد خوبی برای مطالعه می‌داند. نوارهای $^{168}_{72}Hf$ در TSD از طریق محاسبات نیلسون- استروتینسکی که دارای پیکربندی محدود است مورد بررسی قرار گرفته شد. [۱۳] آنها نشان دادند که اوربیتال‌های $high\text{-}j$ بیشتری‌در نوارهای TSD در $^{168}_{72}Hf$ فعال هستند نسبت نوارهای نوسانی هسته‌های A فرد مثل Lu که در آن دوران هم‌راستا شده $i_{\frac{13}{2}}$ شبه-پروتون نقش حیاتی را ایفا می‌کنند. همچنین در ساختارها TSD را در ناحیه جرمی $A\sim 160$ تشخیص دادند که خطوط ایرست ND، ایزوتون‌های $N=92$ به صورت سیستماتیک در انرژی برانگیختگی در اسپین بالا، از همسایه‌های خود بالاتر هستند. [۱۸] این موضوع ممکن است منجر به انرژی برانگیختگی نسبی کمتری برای نوارهای TSD شود که به صورت بالقوه منجر به افزایش تعداد آنها در بقایای واکنش

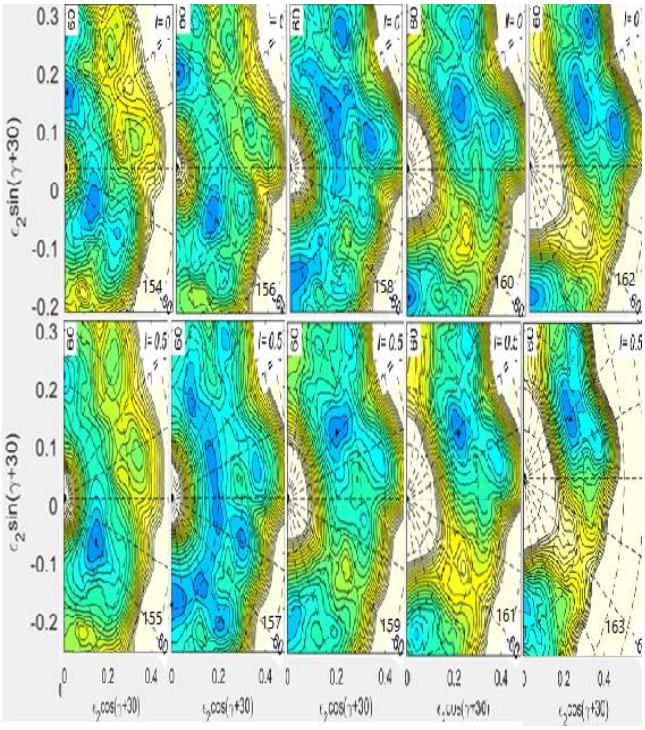
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

همجوشی-تبخیر شود. [۱۷] در جدول۱ در این ناحیه جرمی مشاهده شد که با افزایش تعداد نوترونها و با دور شدن از پوسته نوترونی $N=82$ پارامتر تغییر شکل چارقطبی رو به افزایش است،

جدول۱: پارامترهای تغییر شکل و حداقل انرژی در ایزوتوپهای هسته Er

هسته	ε_2	ε_4	γ	$E_{\min}(MeV)$	ε_2[10]
$^{154}_{68}Er$	0.15	−0.0135	−60°	−59.591	0.133
$^{155}_{68}Er$	0.166	−0.016	−58.85°	−60.124	0.150
$^{156}_{68}Er$	0.182	−0.020	−57.46°	−61.057	0.175
$^{157}_{68}Er$	0.19	−0.020	−120°	−60.629	0.192
$^{158}_{68}Er$	0.207	−0.035	3.11°	−61.541	0.200
$^{159}_{68}Er$	0.235	−0.022	0.75°	−62.047	0.217
$^{160}_{68}Er$	0.246	−0.024	−118.12°	−62.817	0.213
$^{161}_{68}Er$	0.249	−0.020	−1.15°	−62.873	0.242
$^{162}_{68}Er$	0.25	0.051	18.55°	0	0.250
$^{163}_{68}Er$	0.262	−0.005	−2.25°	−62.877	0.250

بنابراین می‌توان دریافت هسته از شکل کروی دورتر شده و تغییر شکل آن بیشتر می‌شود، همچنین برای مقادیر ε_4 قابل مشاهده است که (به جز در $N=162$) ابتدا رو به کاهش و سپس رو به افزایش می‌باشند.



شکل۱: نمودارهای PES در صفحه (ε,γ) برای ایزوتوپ‌های $^{154-168}_{68}Er$ در حالت پایه ، با استفاده از مدل ماکروسکوپی-میکروسکوپی نیلسون-استروتینسکی-کرنک شده با پتانسیل نوسانگر هماهنگ اصلاح شده و با صرف نظر از جفت شدگی $(\hbar\omega=0)$

در کار حاضر در تراز تک ذره $^{162}_{68}Er$ که پوسته پنجم پروتونی و نوترونی در حال پر شدن می‌باشد به ترتیب $1h_{\frac{11}{2}}$ و $2f_{\frac{7}{2}}$ یک گپ بزرگ وجود دارد فاصله انرژی این گپ نزدیک به $1MeV$ می‌باشد که بدیهی است این گپ به تغییر شکل هسته بستگی دارد و به فرکانس دورانی آن بستگی ندارد. این نکته در مورد ایزوتوپ $A=162$ جالب توجه است که تنها این ایزوتوپ دارای ε_4 مثبت و نسبتاً بزرگ است و همچنین در حالت پایه شکل TSD آن ایرست می‌باشد که بررسی این ویژگی‌ها موضوع مطالعات بعدی ما خواهد بود.

مرجع‌ها

[۱] Wadsworth, R., et al. "Evidence for shape coexistence at medium spin in ۷۶Rb." *Phys Lett B* ۷۰۱,۳ (۲۰۱۱): ۳۰۶-۳۱۲.
[۲] Shohani, S., and A. Kardan. "Shape coexistence in even–even Po isotopic chain." International Journal of *Mod Phys E* ۲۸,۱۰ (۲۰۱۹).
[۳] Walker, P. M., F. R. Xu, and D. M. Cullen. "Prolate-oblate shape coexistence at high spin in Hf ۱۷۵." Phys Rev C ۷۱,٦ (۲۰۰۵): ۰٦۷۳۰۳.
[٤] Heyde, Kris, and John L. Wood. "Shape coexistence in atomic nuclei." *Rev. Mod. Phys.* ۸۳, ۱٤٦۷ (۲۰۱۱): ۱٦٥٥.
[٥] García-Ramos, José Enrique, et al. "Shape evolution and shape coexistence in Pt isotopes: Comparing interacting boson model configuration mixing and Gogny mean-field energy surfaces." *Phys.Rev C* ۸۹,۳ (۲۰۱٤): ۰۳٤۳۱۳.
[٦] Wood, J. L., et al. "Coexistence in even-mass nuclei." *Phys reports* ۲۱٥,۳-٤ (۱۹۹۲): ۱۰۱-۲۰۱.
[۷] Heyde, K., et al. "Coexistence in odd-mass nuclei." *Phys Reports* ۱۰۲,٥-٦ (۱۹۸۳): ۲۹۱-۳۹۳.
[۸] Julin, R., K. Helariutta, and M. Muikku. "Intruder states in very neutron-deficient Hg, Pb and Po nuclei." *JPG: Nuclear and Particle Physics* ۲۷,۷ (۲۰۰۱): R۱۰۹.
[۹] Guan, Xin, et al. "Ground-state shape evolution in Er and Yb isotopes." *Nucl Phys A* ۹۸٦ (۲۰۱۹): ۸٦-۹۷.
[۱۰] E. Walter Meyerhof, Elements of nuclear physics, *New York, McGraw-Hill,* (۱۹٦۷).
[۱۱] Kardan, Azam, and Sepideh Sayyah. "Shape evolution with angular momentum in Lu isotopes." *IJMPE*, ۲٥,۰٦ **(۲۰۱٦)**: ۱٦٥۰۰٤٤.
[۱۲] S. G. Nilsson and I. Ragnarsson, "Shapes and Shells in Nuclear Structure", *Cambridge University Press,Cambridge, England,* (۱۹۹٥).
[۱۳] A. Kardan, et al, "Interpretation of the large-deformation high-spin bands in select A=۱٥۸–۱٦۸ nuclei." *Phy. Rev. C*, ۸٦,۱ (۲۰۱۲)
[۱٤] K. Pomorski, and J. Dudek, " Nuclear liquid-drop model and surface-curvature effects", *Phys. Rev. C*, ٦۷,٤ (۲۰۰۳): با تشکر از توجه شما ۰٤٤۳۱٦.
[۱٥] Singh, A. K., INGA collaboration, and Gammasphere Collaboration. "Collective and non-collective structures in nuclei of mass region A≈ ۱۲٥." *AIP Conference Proceedings.* Vol. ۱٦۰۹. No. ۱. *American Institute of Physics*, (۲۰۱٤).
[۱٦] Tanabe, Kosai, and Kazuko Sugawara-Tanabe. "Shape coexistence at high spins in ۱٥۸Er and ۱٦۰Yb predicted by the self-consistent calculation." *Phys Lett B* ۱۳٥,٥-٦ (۱۹۸٤): ۳٥۳-۳٥۷.
[۱۷] Meyer-Ter-Vehn,J. (۱۹۷۸). "Transitional nuclei and triaxial shapes.", *Le Journal de Physique Colloques*, ۳۹(C۳), C۳-۱٥٤.
[۱۸] Mukhopadhyay, S., and W. C. Ma. "Erratum to: Nuclear triaxiality in the A~ ۱٦۰–۱۷۰ mass region: the story so far." *Pramana* ۸۳,٦ (۲۰۱٤): ۱۰۳٥-۱۰۳٥.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

انرژی بستگی هایپرون و جرم هایپر هسته‌ها در پتانسیل هالثن

آرزو جهانشیر[۱]؛ اکویووگبه اموگبه[۲]

[۱] گروه فیزیک و علوم مهندسی، مرکز آموزش عالی فنی و مهندسی بوئین زهرا

[۲] گروه فیزیک، دانشگاه فدرال منابع نفتی، ایالت دلتا، نیجریه

چکیده

طیف جرم هایپر هسته‌های تک هایپرونی(Σ ، Ω ، Ξ ،Λ با توجه به اهمیتی که در برهم‌کنش‌های قوی و ساختارهای مقید نوین دارند با اشاره به اهمیت اثرات نسبیتی جرم در پیوند مقید خوشه‌های هسته-هایپرون و هسته-هایپرون و در نظر نگرفتن اثرات اسپینی برهمکنش، معادله شرودینگر با دخالت انرژی نسبیتی در پتانسیل هالثن در نظر گرفته شده است. حالات پایه و برانگیختهٔ خوشه‌های هادرونی با تلفیق سری برنولی محاسبه شده است. در این روش سری برنولی به ما این اجازه را می‌دهد تا در تبدیل بسط پتانسیل هالثن که از نوع جاذبه‌ای است، توان‌های ضرایب فرد را صفر کرده و سری بازنویسی شده با ضرایب زوج در مراتب بالاتر را وارد معادلات شود که با تبدیل فضای همتافته، متغیرهای کانونیک را در مراتب بالا بدست می‌آوریم. دستاورد روش تلفیقی ذکر شده با مقایسهٔ نتایج تجربی نشان می‌دهد، طیف جرم حالات پایه و برانگیخته به نتایج تجربی نزدیک‌تر بوده و تاییدی بر نقش حذف توان‌های فرد و اثر توانهای زوج مرتبه بالا در بسط پتانسیل هالثن دارد که در این مقاله به آن پرداخته شده است.

Hyperon Binding Energy and Mass of Hypernuclei within Hulthen Potential

Arezu Jahanshir[1]; Ekwevugbe Omugbe[2]

[1]*Department of Physics and Engineering Sciences, Buein Zahra Technical University, Qazvin, Iran*

[2]*Department of Physics, Federal University of Petroleum Resources, Effurun, Delta State, Nigeria*

Abstract

The mass spectra of the hyperonuclei of single hyperons (Λ, Ξ, Ω, Σ) due to their importance in strong interactions and new constrained structures, are obtained based on the relativistic mass effects in the Schrödinger equation within the Hulthen potential. The method of interaction of hyperon-core and hyper-core-hyperon and not considering the spin effects of the interaction, the Schrödinger equation is considered with the involvement of relativistic energy in the Hulthen potential which in this article deals with hyperon-core clusters. The ground and excited states of the hadron clusters are obtained by combining the Bernoulli series in the expansion of the Hulthen potential (which is of the gravitational type). In this method, the Bernoulli series allows us to zero the powers of odd coefficients in the Hulthen potential expansion, and to represent it with even coefficients with higher-order in the equations, which convert the canonical variables to higher-order by converting the simplistic space. The achievement of the combined method mentioned by comparing the experimental results shows that the determined mass spectrum is closer to the measured results and confirms the role of elimination of individual powers and the effect of high-order pair powers on the expansion of the Hulthen potential.

مقدمه

مطالعهٔ سامانه‌های مقید هایپرهسته‌های اپزوتیک دو هایپرونی و سه هایپرونی یکی از مباحث مهم و قابل تامل در هر دو زمینهٔ نظری و تجربی است. اهمیت این موضوع در مباحث مربوط به بررسی پرتوهای کیهانی ناشی از برهم‌کنش‌های هسته‌ای، برهم‌کنش‌های تجزیه مزونی و ظیف سنجی هسته‌ای که کاربرد اساسی دارد. دستاوردهای نتایج آزمایشات تجربی سال‌های ۱۹۷۰ انجام شده در طیف سنج برهم‌کنش کائون-مزون در BNLAGS، [۱] و آزمایشات اخیر در طیف سنج ابرسانای کائونیک (SKS) ۱۲ گیگاالکترون ولتی مرکز تحقیقات KEK [۲] در سیکلوترون پروتونی ژاپن حالات برانگیخته جدیدی را در برهم‌کنش هسته و مزون‌ها با هم نشان داده است که شکل‌گیری هایپرهسته‌های سبک و میانی $^{11}_{\Xi}B$

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$^{10}_{\Lambda}Be$، $^{13}_{\Xi}C$، $^{12}_{\Xi}Be$، $^{12}_{\Xi}B$ در کنار واپاشی ساختارهای دو هایپرونی سبک مانند $^{6}_{\Lambda\Lambda}He$، $^{10}_{\Lambda\Lambda}Be$، $^{13}_{\Lambda\Lambda}B$ و غیره رصد شده است [۳و٤]. معادلهٔ هامیلتونی ساده برای محاسبهٔ طیف جرم و انرژی حالت‌های مقید در شرایط نسبیتی و غیر نسبیتی، عموما با استفاده از روش‌های نیکیفوروف-اووارف، وردشی، مکانیک کوانتومی فوق متقارن (SUSYQM)، روش مبتنی بر تکرار (AEIM)، قاعدهٔ کوانتش تصحیحی، روش تبدیل لاپلاس (LTM)، روش مجانبی مبتنی بر تکرار (AIM)، روش خطی‌سازی گوسی(QLM) تقریب پکریس و دیگر روش‌های معمول تقریبی بدست می‌آید. در این مقاله روش متفاوتی برای بازشناخت طیف جرم هایپرهسته‌ها را در پتانسیل هالثن ارایه داده و حل تحلیلی آن را بدست می‌آوریم. پتانسیل هالثن را در بسط مشخص شدهٔ برنولی بازنویسی می‌نماییم و هامیلتونی پیوند مقید کنندهٔ هسته-هایپرون را با استفاده از روش تبدیلی متغیرهای کانونیک در فضای همتافته در حالت پایه و برانگیخته بدست می‌آوریم. مهمترین نکته در روش پیش رو بدست آوردن بسط برنولی پتانسیل هالثن است که با تبدیل فضای R^d به فضای همتافتهٔ d بعدی، هامیلتونی را تا توان‌های زوج مرتبهٔ ششم و هشتم و بالاتر بدست می‌آوریم[۵]. بنابراین حذف توان‌های فرد بزرگتر از یک به ما این امکان را می‌دهد تا تقریب پتانسیل برنولی هالثن را با عبارات بیشتری بازنویسی کنیم و طیف جرم را نسبت به توان‌های اول و دوم بدست آمده از روش‌های دیگر، دقیق‌تر و راحت‌تر محاسبه نماییم[٦،٧]. از این رو محاسبهٔ خصوصیات و ویژگی‌های طیف جرم و انرژی هایپرساختارهای اگزوتیک اهمیت دارد و در این مقاله تحت برهم کنش هسته-هایپرون در پتانسیل هالثن به آن پرداخته شده است.

ساختارهای مقید هایپرون-هسته

ساختارهای مقید هادرونی شگفت که اخیرا مورد توجه بسیاری از فیزیک‌پیشگان قرارگرفته اند، اطلاعات جامع و کارآمدی را از برهم‌کنش هسته‌های سبک و سنگین با هادرون‌های هایپرونی در اختیارمان قرار می‌دهند. بنابراین هامیلتونی کل سیستم که تمامی برهم‌کنش‌های موثر در پیوند مقید هسته-هایپرون را در بر داشته باشد در معادلات و محاسبات نظری و در تطابق دستاوردهای تجربی و نظری نقش اصلی و مهمی را ایفا می‌کند. از این رو برهم‌کنش مقید هسته-هایپرون را در پتانسیل نمایی هالثن در نظر می‌گیریم. رویکرد پیشنهادی برای محاسبهٔ طیف جرم هایپرهسته‌ها با در نظر داشتن تغییرات نسبیتی جرم عبارت از کاربرد نظری رفتار مجانبی تابع عملگر قطبش حلقهٔ دو ذرهٔ باردار در میدان پیمانه‌ای خارجی می‌باشد[۵]. اثرات و اصلاحات نسبیتی به واسطهٔ نظریهٔ کوانتومی میدان و روش تبدیلی متغیرهای کانونیک در فضای همتافته برای حالت پایه و برانگیخته طیف جرم سیستم مقید دو ذره‌ای هسته-هایپرون به خوبی توصیف کرده و در مقایسه با جرم ذرات در حال سکون به وضوح تاثیر برخورد قوی هادرونی را در پیوند مقید نمایان می‌کند. در نظریهٔ میدان‌های کوانتومی تابع عملگر قطبش حلقه مستقیما با تابع گرین مرتبط شده و با استفاده از روش‌های ریاضی معادلات محاسبهٔ جرم و انرژی پیوند مقید هادرونی بدست می‌آید. به عبارت دقیق‌تر با استفاده از روش محاسبهٔ میانگین روی کل حالات میدان و در نظر گرفتن مراتب پایین اثرات همبستگی دو نقطه‌ای گوسی، تابع گرین بر اساس مبانی میدان‌های کوانتومی ناشی از برهم‌کنش ذرات و جریان بار حقیقی آنها تعیین می‌شود [۵]. سپس با استفاده از مدل ریاضی انتگرال‌های تابعی، حل تابع گرین را از طریق انتگرال مسیر فاینمن برای برهم‌کنش هادرون‌ها (هسته و هایپرون) و تعیین جرم و مقادیر ویژهٔ انرژی بازنویسی می‌نماییم [۵]. تابع جریان حقیقی ذرات $J_\mu(x)=\Psi^*(x)\Psi(x)$ و تابع قطبش حلقه $\Pi(x-y)$ به صورت زیر با تابع گرین مرتبط هستند:

$$\Pi(x-y)=\langle J_\mu(x)J_\mu(y)\rangle=\langle\Psi^*(x)\Psi(x)\Psi^*(y)\Psi(y)\rangle$$
$$\langle G_{m_1}(x_1,x_2|E)\cdot G^*{}_{m_2}(x_2,x_1|E)\rangle$$

بعد از بازنویسی معادلات در شرایط مجانبی $|x-y|=\!\!\rightarrow\infty$ و بازنویسی تابع گرین در نمایش انتگرال مسیر با پتانسیل برهم کنشی $U(\mu_1,\mu_2)$ خواهیم داشت:

$$\Pi(x-y)=\int_0^\infty\int_0^\infty\frac{d\mu_1 d\mu_2}{(8(x-y)\pi^2)^2}exp\left\{-\frac{1}{2}|x-y|\left(\frac{m_1^2}{\mu_1}+\mu_1\right)-\frac{|x-y|}{2}\left(\frac{m_2^2}{\mu_2}+\mu_2\right)\right\}U(\mu_1,\mu_2)$$

که برهم کنش دو ذره به جرم m_1، m_2 و جرم در برهم کنش μ_1وμ_2 را توصیف می‌کند با انجام یکسری محاسبات که در مرجع [۵] ارایه شده است، جرم مقید هایپرهسته‌ها و ویژه مقادیرانرژی

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

حالات پایه و برانگیختهٔ آنها را مطابق روابط زیر تعیین شده و محاسبه‌می‌شود[۵]:

$$E(\mu_1,\mu_2) \cong \lim_{|x-y|\to\infty} \frac{ln\, U(\mu_1,\mu_2)}{|x-y|} \qquad (۱)$$

$$M \cong \lim_{|x-y|\to\infty} \frac{ln\, \Pi(x-y)}{|x-y|} \qquad (۲)$$

توابع انتگرال مسیر فاینمن برای دو ذرهٔ در حال حرکت به جرم μ_1 ،μ_2 و جرم سکون m_1 ،m_2 رهیافتی برای حل روابط (۱) و (۲) پیش رویمان قرا می‌دهند که با استفاده از آن که در مرجع [۵] به طور کامل بیان شده است طیف جرم سیستم مقید هایپر هسته با اطلاحات نسبیتی بدست می‌آید:

$$M = \min_{\mu_1,\,\mu_2}\left(E(\mu) + \frac{\mu_1+\mu_2}{2} + \frac{m_1^2\mu_2 + m_2^2\mu_1}{2\mu_1\mu_2}\right) \Rightarrow$$

$$M = \mu_1 + \mu_2 + \mu\frac{\partial E(\mu)}{\partial \mu} + E(\mu) \Rightarrow$$

$$M = \sqrt{m_1^2 - 2\mu^2\frac{\partial E(\mu)}{\partial \mu}} + \sqrt{m_2^2 - 2\mu^2\frac{\partial E(\mu)}{\partial \mu}} + \\ +\mu\frac{\partial E(\mu)}{\partial \mu} + E(\mu). \qquad (۳)$$

و برای تعیین و محاسبهٔ مقادیر ویژهٔ انرژی سیستم مقید هایپر هسته (هسته–هایپرون) از معادلهٔ شرودینگر استفاده می‌کنیم. به منظور در نظر داشتن اثرات نسبیتی برهم‌کنش در هامیلتونی سیستم انرژی جنبشی نسبیتی را وارد کرده و معادلهٔ شرودینگر را بازنویسی می‌کنیم:

$$\left[\sqrt{\hat{P}^2 + m_1^2} + \sqrt{\hat{P}^2 + m_2^2} + \\ +U(x) - M\right]\Psi(x) = 0 \qquad (٤)$$

با استفاده از رابطهٔ $\sqrt{\hat{P}^2 + m^2} \approx \min_{\mu}\frac{1}{2}\left(\mu + \frac{m^2+\hat{P}^2}{\mu}\right)$ معادلهٔ (٤) به صورت زیربدست می‌آید:

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2} + \mu U(x) - \mu M + \frac{1}{2}\mu_1\mu_2 + \\ +\frac{1}{2}\frac{m_1^2\mu_2 + m_2^2\mu_1}{\mu_1+\mu_2}\right]\Psi(r) = 0 \qquad (٥)$$

جرم کاهیدهٔ سیستم مقید هایپر هسته برابر است با $\mu = \frac{\mu_1\mu_2}{\mu_1+\mu_2}$. جرم ذرات هسته و هایپرون در سیستم مقید شده برابر μ_1 ،μ_2 است که در رابطهٔ (۳) تعیین شده است. اکنون معادلهٔ شرودینگر از فضای اولیهٔ R^n – بعدی را با شکل صریحی از عملگرهای نردبانی متغیرهای کانونیک $[\hat{q},\hat{p}\,] = \delta_{ij}$ بدست می‌آوریم که نمایشی از نوسانگرهای کوانتومی با فرکانس ω در حالت پایه و یا برانگیخته را در فضای کمکی d –بعدی جدید نشان می‌دهند:

$$\hat{a}^- + \hat{a}^+ = \sqrt{2\omega}\hat{q} \quad (٦)\,, \quad \hat{a}^- - \hat{a}^+ = \sqrt{\frac{2}{\omega}}\,i\,\hat{p} \qquad (٧)$$

تبدیل هنجارشدهٔ عملگرهای کانونیک همتافته $\hat{p}^{2n}, \hat{q}^{2n}$، با تعریف پارامتر جدید $x = q^{\frac{2}{1+\sigma}} = q^{2\rho}, \rho = \frac{1}{1+\sigma}$ در فضای کمکی به ابعاد $d = 2 + 2\rho + 4\rho\ell$ ($-\ell$ عدد کوانتومی اربیتالی) و شرط $\sigma > 0$ بدست می‌آید. حالت مجانبی تابع موج پیوند مقید هایپر هسته ($x \to \infty$)، بر اساس پارامتر جدید فضای کمکی به صورت $\Psi(x) \sim e^{-\alpha(x)} = e^{-x^{1+\sigma}}$ و شکل هنجارشدهٔ تبدیلات نردبانی توان‌های زوج را نیز به صورت زیر بدست می‌آوریم[۵,٦,۷]:

$$\hat{q}^{2n} \cong \omega^{-n}\Gamma(n+1+\rho+2\rho\ell)\Gamma^{-1}(1+\rho+2\rho\ell).$$
$$\hat{p}^2 \cong (1+\rho+2\rho\ell)\omega, \qquad n = 1.2.3.\cdots \qquad (٨)$$

با استفاده از بازنویسی پتانسیل هالثن $V_H(x)$ در سری برنولی $f_B(x)$:

$$V_H(x) = -V_0\cdot\frac{e^{-\lambda x}}{1-e^{-\lambda x}} \cong -\frac{V_0}{\lambda x}\cdot f_B(x) = -\frac{V_0}{\lambda x}\cdot\left[1 - \right. \\ \left. -\frac{1}{2\cdot 1!}\lambda x + \frac{1}{6\cdot 2!}(\lambda x)^2 - \frac{1}{30\cdot 4!}(\lambda x)^4 + \cdots\right] \qquad (٩)$$

مقدار ثابت بوده و معرف دامنهٔ پتانسیل برهم‌کنشی هالثن $V_0 = \frac{\beta}{a}$ می‌باشد که β . a به ترتیب پارامتر پوشش میدان و ضریب ثابت هستند. با جایگذاری روابط (۸) و (۹) در رابطهٔ (٤) و با شرط ($\rho \cong 1$) که از رابطهٔ $\frac{dE(\mu))}{d\rho} = 0$ در فضای همتافته مشخص می‌شود[٥,٦]، معادلهٔ شرودینگر را برای برهم‌کنش مقید هسته–هایپرون بازنویسی کرده و مقادیر ویژهٔ انرژی و جرم مقید هایپر هسته را بدست می‌آوریم.

جرم هایپرهسته‌های سبک

در این بند با استناد بر روابط فضای همتافته و کاربرد سری برنولی در بسط پتانسیل هالثن، محاسبهٔ جرم و ویژه مقادیر انرژی برهم‌کنش تبادلی هسته–هایپرون در حالات پایه و برانگیخته برای هسته‌های سبک و هایپرون لاندا ارائه شده است. استفاده از روش فضای همتافته بدست آمده از بازنویسی عملگرهای خلق و فنا یکی از روش‌های حل معادلهٔ شرودینگر است که در این مقاله با آن پرداخته شد و معادلهٔ شرودینگر(٤) با اصلاحات نسبیتی جرم از روابط (۳) بصورت زیر بدست می‌آید:

$$H\Psi(q) = E(\mu)\Psi(q) \to \varepsilon_0 = [H - E(\mu)]\Psi(q) = 0.$$

$$\varepsilon_0 = \frac{d\omega}{4} + 4\mu\rho^2 q^{4\rho-2}\left(\left[-\frac{V_0}{\lambda q^{2\rho}} + \frac{V_0}{2\cdot 1!} - \right.\right. \\ \left.\left.\frac{V_0}{6\cdot 2!}\lambda q^{2\rho} + \frac{V_0}{30\cdot 4!}(\lambda q^{2\rho})^3 + \cdots\right] - E(\mu)\right) = 0 \qquad (١٠)$$

با شرط ($\rho \cong 1$):

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$$\varepsilon_0 = \frac{d\omega}{4} + \left(\left[-4\mu\frac{V_0}{\lambda} + 2\mu V_0 q^2 - \mu\frac{V_0}{3}\lambda q^4 + \mu\frac{V_0}{30\cdot6}\lambda^3 q^8 + + \cdots\right] - 4\mu q^2 E(\mu)\right) = 0 \quad (11)$$

با استناد بر این نکته که ساختار مقید ذرات در حکم نوسانگر کوانتومی پتانسیل دلخواه هستند از دو رابطهٔ $\varepsilon_0(\omega.\mu) = 0$ و $\frac{d\varepsilon_0(\omega.\mu)}{d\omega} = 0$، جرم حالت پایه ${}^{A}_{\Lambda}X$ ، ${}^{A}_{\Xi^-}X$و مقادیر ویژهٔ انرژی هایپرهسته را با در نظر گرفتن سه ضریب اول بسط برنولی از رابطهٔ زیر محاسبه می‌کنیم:

$$M_{{}^{A}_{\Lambda}X} = \sqrt{m^2_{{}^{A-1}X} + \left(\frac{2V_0}{3\lambda}\right)^2} + \sqrt{m^2_{\Lambda} + \left(\frac{2V_0}{3\lambda}\right)^2} - 2\mu\left(\frac{V_0}{3\lambda}\right)^2 + E(\mu). \quad (12)$$

$$E(\mu) = \frac{\omega^2}{8\mu} - \frac{V_0}{2\lambda}\omega + \frac{V_0}{2} - \frac{\lambda}{4\omega}. \quad (13)$$

و جرم کاهیدهٔ سیستم و جرم هادرون‌ها در پیوند مقید و بسامد نوسانگر کوانتومی به ترتیب برابر است با

$$\mu = \frac{\mu_{{}^{A-1}X}.\mu_{\Lambda}}{\mu_{{}^{A-1}X}+\mu_{\Lambda}}, \quad (14)$$

$$\mu_{{}^{A-1}X} = \sqrt{m^2_{{}^{A-1}X} + \frac{\omega^2}{4}}, \quad \mu_{\Lambda} = \sqrt{m^2_{\Lambda} + \frac{\omega^2}{4}}, \quad (15)$$

$$\omega^3 - 2\mu\frac{V_0}{\lambda}\omega^2 + \mu d = 0 \Rightarrow \omega = \frac{4V_0}{3\lambda}\mu \quad (16)$$

نتایج محاسبات در جدول۱ ارائه شده است.

جدول۱ : جرم و انرژی بستگی هایپرون در هایپر هسته‌ها (MeV)، پارامترهای پتانسیل هالثن [۹] $\lambda = 0.105GeV.V_0 \cong 0.56\lambda$

	M	$\mu_{{}^{A-1}X}$	$\mu_{\Lambda}(\mu_{\Xi^-})$	$-B_{\Lambda}(B_{\Xi^-})$	$B_{\Lambda}(B_{\Xi^-})$ Exp. [۸]	$B_{\Lambda}(B_{\Xi^-})$ Teop. [۸]
${}^{10}_{\Lambda}Be$	۹۴۴۰.۰۲۰	۸۴۶۷.۵۳۸	۱۲۳۵.۳۰۱	۱۱.۵۰۷	۹.۱۱±۰.۲۲	۹.۶۷۱
${}^{12}_{\Xi^-}Be$	۱۱۴۹۶.۱۳۱	۱۰۳۴۸.۸۸۰	۱۴۶۱.۶۳۹	۱۴.۱۴۸	–	۱۳.۹۷۵
${}^{13}_{\Lambda}C$	۱۲۲۵۴.۲۳۱	۱۱۲۷۸.۲۶۷	۱۲۲۴.۰۰۷	۱۱.۶۷۹	۱۱.۶۹±۰.۱۲	۱۱.۴۴۷
${}^{13}_{\Xi^-}C$	۱۲۴۳۲.۲۹۷	۱۱۲۸۳.۷۱۷	۱۴۵۷.۱۶۴	۱۴.۲۲۲	۱۸.۱±۳.۲	۱۴.۷۲۰
${}^{15}_{\Xi^-}C$	۱۴۳۱۰.۴۲۰	۱۳۱۵۹.۷۴۰	۱۴۵۰.۶۰۸	۱۴.۳۱۳	–	–
${}^{16}_{\Lambda}O$	۱۵۰۶۹.۶۷۱	۱۴۰۹۱.۶۱۸	۱۲۱۸.۰۹۸	۱۱.۷۴۰	۱۲.۵۰±۰.۳۵	۱۲.۶۴۵
${}^{17}_{\Xi^-}O$	۱۶۱۸۶.۴۰۱	۱۵۰۳۴.۱۵۰	۱۴۴۶.۰۵۴	۱۴.۳۶۴	۱۶.۰±۰.۵	۱۵.۴۷۱

نتیجه‌گیری

استفاده از روش بازنویسی پتانسیل هالثن که مشخصه پتانسیل جاذبه‌ای است در بسط برنولی به ما این امکان را می‌دهد تا بتوانیم مقادیر جرم و انرژی بستگی هایپرون را برای هایپر هسته‌های نسبتاً سبک بدست آوریم. نتایج نظری بدست آمده از روش ارائه شده با در نظر داشتن اثرات نسبتی برهم‌کنش هسته و هایپرون بامحاسبات نظری و نتایج تجربی مطابقت خوبی دارد. بنابراین از شیوهٔ ذکر شده در این مقاله به خوبی می‌توان در مطالعهٔ تغییرات جرم هسته و هایپرون در سیستم‌های مقید برای بررسی کانال‌های برهم‌کنش‌های هادرونی و مقایسهٔ رفتار ذرات بهره‌مند شد. روش ارائه شده برای هایپرهسته‌های دو هایپرونی نیز قابل تعمیم است. لازم به ذکر است نتایج محاسبات نظری برگرفته از این پژوهش نشان می‌دهد رفتار هسته‌های با عددجرمی کمتر از ۴۰ نتایج بهتری را با آزمایشات تجربی نشان می‌دهد.

مرجع‌ها

[1] O. Hashimoto, U. Tohoku, “Spectroscopy of Lambda hypernuclei”, Prog. Part.Nucl.Phys. **57** (2006) 564-653.
[2] T Kamae, “Hypernuclear spectroscopy with the low momentum k beam”, proceedings of the 1974 kek summer, (1974).
[3] O. Hashimoto, et al1, “The (π+,K+) reaction and light Λ hypernuclear spectroscopy”, Nucl. Phys.A, **639** (1-2) (1998) 93.
[4] H. Hotchi, et al., “Spectroscopy of medium-heavy Λ hypernuclei via the (π+,K+) Reaction”, Phys. Rev. C **64** (2001) 044302.
[5] M. Dienykhan, G. Efimov, G. GanboldS, N. Nedelko, “*Oscillator Representation in Quantum Physics*”, first ed., Springer-Verlag, DE, (1995).
[6] A. Jahanshir, “Analytical Method Solution of Charmonium Mass within Bernoulli Potential”, 12th Annual Iranian National Conference on Particle Physics and Field, **46** (2022), Shahrood Technical University (in press).
[7] A. Jahanshir, “Bernoulli Series Generating Potentials in the Symplectic Space”, 6th Iranian Conference on Math-Physics, **15** (2022), Qom Technical University.
[8] S. Pal et al., “A study on the ground and excited states of hypernuclei”, Phys. Scr. **95 (**2020) 045301.
[9] I. Horvat, et al., “On the time dependence of j/Ψ suppression by the quark-gluon plasma”, Phys. Lett. B **214** (1988) 237.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مشخصه‌یابی الکتریکی گرافن تولید شده به‌روش انباشت بخار شیمیایی در فشار پایین

کاظمی*، آسیه السادات؛ نوری، عزیز؛ عضدزادگان، فاطمه بهار

دانشکده فیزیک، دانشگاه علم وصنعت ایران، تهران، ایران

چکیده

گرافن، ماده‌ای دوبعدی متشکل از اتم‌های کربن در یک ساختار لانه زنبوری، در ساخت قطعات میکرو و نانوالکترونیک کاربرد دارد. در این پژوهش، گرافن تک‌لایه از طریق انباشت بخار شیمیایی در فشار پایین بر روی ورقه نازک مس تولید شده‌است. مشخصه‌یابی سطحی با میکروسکوپ‌های نوری، نیروی اتمی، الکترونی رویشی گسیل میدانی و طیف‌سنجی رامان جهت تعیین گستردگی، پیوستگی و تعداد لایه‌ها، قبل و بعد از انتقال بر روی بستر عایق تخت صورت گرفته است. نتایج این مشخصه‌یابی‌ها نشان می‌دهد گرافن تک‌لایه به‌صورت گسترده رشد یافته ولی جزایر بسیار کوچک از گرافن چندلایه هم بر روی لایه اول تشکیل شده است. همچنین مشخصه‌یابی جریان-ولتاژ با چهار نیشتر پویا و مشخصه‌یابی مقاومت سطح با چهار نیشتر ایستا، بر روی گرافن رشد یافته و نیز گرافن تجاری، جهت مقایسه، انجام شده است. رفتار جریان-ولتاژ گرافن رشد یافته، به‌دلیل حضور جزایر کوچک چندلایه بر روی ورقه گسترده تک‌لایه غیرخطی است ولی در گرافن تجاری، خطی است. مقاومت سطح هر دو گرافن با افزایش جریان اعمالی، کاهش می‌یابد.

واژه های کلیدی: *گرافن، انباشت بخار شیمیایی، مشخصه یابی جریان-ولتاژ، رامان، میکروسکوپ نیروی اتمی*

Low pressure chemical vapour deposition (LPCVD) growth of graphene and its electrical characterization

Kazemi*, Asieh sadat; Noori, Aziz; Azodzadegan, Fatemeh Bahar

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

Abstract

Graphene, a 2D material, composed of carbon atoms in a honeycomb lattice, is applicable in micro- and nano-electronic devices. In this work, graphene sheets have been produced by low pressure chemical vapour deposition growth on thin Cu films. Optical, atomic force and field emission scanning electron microscopies along with Raman spectroscopy have been employed to characterize graphene sheets in terms of number of layers, sheet extension and continuity before and after wet transfer on flat insulators. These characterizations confirm the formation of small islands of few layer graphene on top of the extended monolayer graphene. Current-voltage characterization and resistance measurements have been performed via dynamic and static 4-point probe devices, respectively on CVD graphene grew here and those bought from Graphenea for comparison. Current-voltage behaviour in the former was nonlinear due to small islands of few layer graphene and, in the latter, was linear. The resistance of both sheets dropped with the increase in the current.

***Keywords**: Graphene, LPCVD, I-V characterization, Raman, AFM*
PACS No.

مقدمه :

گرافن، لایه‌ای دو بعدی از اتم‌های کربن در حالت خالص، دارای ساختاری بدون گاف نواری است و خواص حرارتی، الکتریکی و نوری منحصربه‌فردی را داراست. ساختار نواری متمایز گرافن از بقیه‌ی مواد دوبعدی و نیز حامل‌های بار دارای تحرک پذیری بسیار بالای این ماده، آن را جایگزین مناسبی برای ساختن قطعات الکترونیکی مانند دیودها یا ترانزیستورها قرار داده است. اما

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

در صنعت الکترونیک، گرافن هنوز انتظارات عمومی را برآورده نمی‌کند، زیرا میزان پیوستگی، تک‌لایه بودن و تمیزی گرافن هنوز در حد ایده آل نیست. علیرغم پیشرفت‌های اخیر در رشد گرافن، چالش‌های عمده‌ای در تولید ورقه‌های وسیع، پیوسته، تک‌لایه، بدون ناخالصی و نیز در انتقال آن وجود دارد [۱].

یکی از روش‌های مناسب برای تولید گرافن، روش انباشت بخار شیمیایی[1] است. گرافن تولیدشده به این روش در بسیاری از موارد، قابل مقایسه با گرافن تولید شده از روش لایه‌برداری مکانیکی است و در بعضی موارد مانند رشد در ابعاد وسیع، ارجحیت دارد. ورقه‌های تک‌لایه CVD گرافن بر روی ورقه‌های مسی در ابعاد یک ویفر سیلیکونی تجاری شده‌اند[2] و با قیمت بسیار بالایی که دارند، صرفا مناسب تحقیقات و توسعه در مقیاس آزمایشگاهی هستند. در اکثر کاربردها بخصوص جهت استفاده در قطعات الکترونیکی، لازم است ورقه گرافن از بستر اولیه رسانای خود جدا شده و بر روی بستری عایق انتقال یابد. این کار به‌واسطه یک لایه پلیمری نازک (مانند پلی‌متیل‌متااکریلات[3]) و زدایش شیمیایی بستر اولیه انجام می‌شود. لایه پلیمری به راحتی با گرافن، تماس منسجم ایجاد می‌کند و بعد از انتقال توسط حلال‌های آلی، نیروی خارجی یا گرما از گرافن جدا می‌شود. این جداسازی پلیمر، هیچ‌وقت به‌صورت صددرصد رخ نمی‌دهد و ضایعاتی در مقیاس اتمی بر روی گرافن باقی می‌ماند [۲]. در اینجا، گرافن در فشار پایین بر روی بستر مس خالص با گاز متان به عنوان پیش ماده کربنی و گاز هیدروژن به عنوان گاز کمکی رشد داده شده و بر روی بستر SiO_2/Si انتقال یافته است. مشخصه‌یابی جریان–ولتاژ و مقاومت سطح جهت بررسی کارایی این ورقه به کمک دو دستگاه چهار نیشتر پویا و ایستا انجام شده است. جهت مقایسه، ورقه تک‌لایه گرافن خریداری شده از Graphenea هم عینا بر روی بستر مشابه انتقال یافته و رفتار الکتریکی آن بررسی شده است. توجیه این رفتارها با مشخصه‌یابی سطح نمونه‌ها قبل و بعد از انتقال صورت گرفته است.

مواد و روش:

گازهای هیدروژن ٪ ۹۹,۹۹ (گاز کمکی) و متان ٪ ۹۹,۹ (منبع کربن)، ورقه‌های مس به ضخامت ۳۰ µm (زیرلایه رشد)، زیرلایه SiO_2/Si و محلول‌های مختلف شیمیایی جهت شستشو و زدایش استفاده شده‌اند. ورقه‌های مس به قطعات باریک برش داده شدند و به مدت ۱۰ دقیقه در محلول استیک اسید (جهت حذف لایه نازک اکسیدی از سطح)، و به مدت ۵ دقیقه در محلول اتانول (جهت حذف چربی‌های ممکن از سطح) در حمام اولتراسونیک قرار گرفتند. سپس با آب دوبار تقطیر شستشو داده شده و به مدت ۲ دقیقه به‌کمک هوای فشرده خشک شدند. در نهایت، ورقه‌های مسی تمیز، برای انجام فرایند رشد به محفظه کوارتز دستگاه LPCVD منتقل شدند. در فشار اولیه محفظه (۰,۳۵ mbar) و در دمای ۲۰۰°C، گاز هیدروژن (۷ sccm) جهت جلوگیری از اکسید شدن مس به محفظه وارد شد. دمای محفظه بصورت گام-های زمانی منظم افزایش یافت. با ورود گاز متان در دمای ۹۰۰ °C به محفظه، فرایند رشد آغاز شد. پس از اتمام زمان رشد (۳۰min)، انتشار گاز متان متوقف شده و محفظه با حضور گاز هیدروژن و کاهش دما، سردسازی شد. پس از رسیدن به دمای محیط، نمونه از محفظه خارج گردید. گرافن رشد یافته بعد از مشخصه‌یابی‌های مختلف سطح، برای جداسازی از مس و انتقال بر روی بستر ذکر شده آماده شد. در این مرحله، لایه نازکی از محلول PMMA به طور یکنواخت روی سطح گرافن نشانده شده و با اعمال دمای ۹۰ °C تثبیت شد. ورقه گرافن با پلیمر لایه نشانی شده، در محلول $FeCl_3$ قرار گرفت و پس از زدایش کامل مس، به ظرف آب دوبار تقطیر منتقل شد. این ورقه شناور بر روی آب با فرایند مصطلح به ماهی‌گیری[4] بر روی بستر مورد نظر انتقال یافت. لایه نازک پلیمری بعد از اتصال کامل گرافن به زیرلایه، با استون و اعمال حرارت تا حد بسیار زیادی از بین رفت.

نمونه‌های گرافن، برای مشخصه‌یابی رامان (تکرام N-541) در بازه طول موج 530-700 nm، مشخصه‌یابی جریان–ولتاژ با ولت‌متر (نانوپژوهان راگا) متصل به چهار نیشتر پویا، و نیز

[1] Chemical vapour deposition (CVD)
[2] Graphenea & Graphene Supermarket
[3] PMMA
[4] Fishing

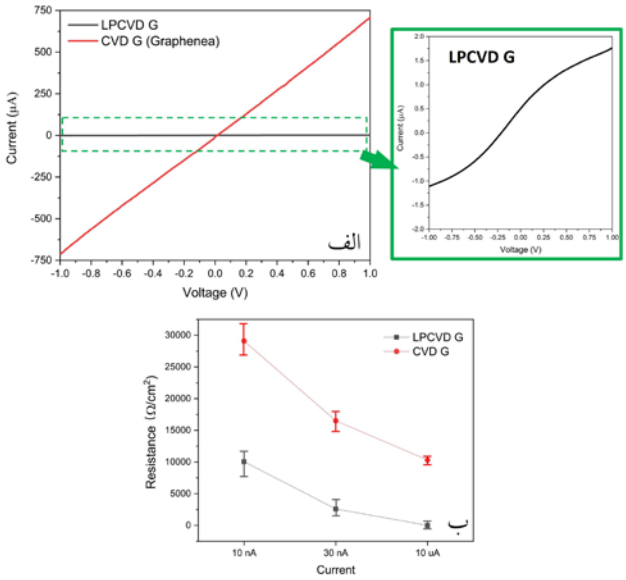
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مشخصه‌یابی مقاومت الکتریکی با چهار نیشتر ایستا (Jandel RM3000 4-point probe) آماده شدند. میکروسکوپ نوری بازتابی (نانوپژوهان راگا)، میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی (TESCAN-Mira3) در ولتاژ ۱۵ kV و میکروسکوپ نیروی اتمی (آرا پژوهش- Advanced) در مد تماسی برای مشخصه‌یابی ساختار سطح استفاده شده‌اند.

نتایج و بحث :

شکل ۱ (الف) نمودار جریان-ولتاژ گرافن رشد یافته به روش انباشت بخار شیمیایی در فشار پایین و گرافن خریداری شده را نشان می‌دهد. همانطور که از مقایسه این دو بر می‌آید، در محدوده ولتاژ اعمالی، رفتار جریان-ولتاژ گرافن خریداری شده خطی و گرافن رشد یافته غیرخطی است. این تفاوت می‌تواند ناشی از تفاوت ضخامت موضعی گرافن‌های مذکور باشد. با توجه به مشخصه‌یابی‌های میکروسکوپ نیروی اتمی، میکروسکوپ الکترونی گسیل میدانی و نیز طیف‌سنجی رامان، گرافن رشد یافته در این تحقیق، علاوه بر تک‌لایه گسترده، جزایری کوچک متشکل از چند لایه اتمی دارد ولی گرافن خریداری شده به‌صورت گسترده، تک‌لایه است. به دلیل تک‌لایه بودن این نوع گرافن، احتمال عبور الکترون‌ها نسبت به چندلایه بیشتر است. هنگامی که الکترون‌ها در گرافن تک‌لایه به موانع (هم ارز سد پتانسیل) می‌رسند، احتمال عبور کامل آنها از موانع در زوایای مختلف فرود، بیشتر است؛ لذا نمودار جریان-ولتاژ مربوطه خطی می‌شود [۳و٤].

در یک مطالعه مقایسه‌ای، رفتار جریان-ولتاژ گرافن تک‌لایه بر روی عایق سیلیکون دی اکسید (SiO_2) در محدوده 1V- تا 1V نیز خطی گزارش شده است [۵]. از طرفی، بیشینه شدت جریان در گرافن رشد یافته حدود ۱۷۵۰ nA و در گرافن خریداری شده حدود ۷۵۰ µA است. بیشینه بهره‌وری از ویژگی‌های منحصر به‌فرد گرافن، با زدودن کامل پلیمر استفاده شده از روی سطح محقق می‌شود. تحقیقات نشان داده که رسوبات ناشی از این پلیمر در دمای بالا حتی در حضور خلاء و یا با کمک محلول‌های شیمیایی تا حدی بر روی سطح گرافن باقی می‌مانند و بطور کامل از بین نمی‌رود [٦]. همین معضل، یکی از چالش‌های مهم استفاده از گرافن گسترده بدست آمده از روش انباشت بخار شیمیایی است. هنگام اعمال ولتاژ، این آلودگی‌ها به عنوان منبع پراکندگی الکترون‌ها عمل می‌کنند و انتقال الکترون‌ها با سرعت و تعداد کمتری رخ می‌دهد، تحرک پذیری الکترون و ترابرد الکتریکی آن کم می‌شود، لذا جریان به دست آمده کمتر از حد انتظار است [۷].

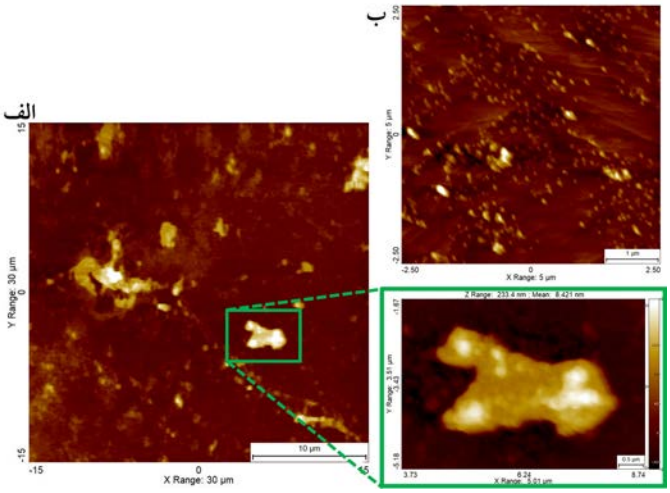


شکل ۱: (الف) مقایسه رفتار جریان-ولتاژ دو نمونه گرافن؛ گرافن رشد یافته به روش انباشت بخار شیمیایی در فشار پایین (مشکی) و گرافن خریداری شده (قرمز). شکل داخل کادر، رفتار واضح غیرخطی گرافن رشد یافته را نشان می‌دهد. (ب) مقایسه تغییرات مقاومت سطح دو نوع گرافن با تغییرات جریان الکتریکی؛ گرافن رشد یافته به روش انباشت بخار شیمیایی (مشکی) و گرافن خریداری شده (قرمز).

از دیگر روش‌های مشخصه‌یابی الکتریکی، سنجش مقاومت سطح است. رسانندگی و مقاومت با یکدیگر رابطه‌ی عکس دارند. مقاومت سطح همان مقاومت نسبت به جریان الکتریکی ایجاد شده در واحد سطح است. همانطور که از شکل ۱ (ب) پیداست، با افزایش جریان، مقاومت به مقدار چشم‌گیری در هر دو مقیاس میکرو و نانوآمپر، مشابه [۸] کاهش پیدا کرده است. این کاهش در محدوده نانوآمپر برای هر دو گرافن رشدیافته و خریداری شده سریع‌تر است. بطور کلی، مقاومت سطح گرافن خریداری شده در تمامی جریان‌ها، از گرافن رشدیافته بیشتر است.

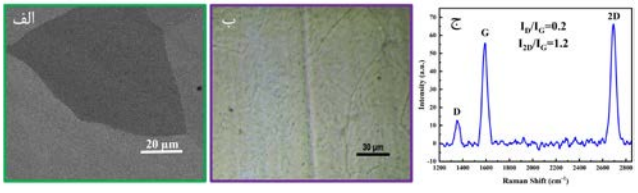
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مشخصه‌یابی‌های سطح، قبل و بعد از انتقال بر روی بستر عایق در شکل‌های ۲ و ۳، موید تشکیل گرافن تک‌لایه گسترده و نیز جزایر کوچک چندلایه به‌علاوه ضایعات باقیمانده از پلیمر در فرایند انتقال است که رفتارهای الکتریکی مذکور را توجیه می‌کند. تشکیل جزیره‌های کوچک چندلایه در فرایند رشد به تغییرات موضعی دمای رشد، نسبت گاز هیدروژن به متان و میزان ناهمواری ورقه مس در هسته‌زایی کربنی مربوط است.



شکل۲: تصاویر میکروسکوپ نیروی اتمی گرافن رشد یافته به روش انباشت بخار شیمیایی در فشار پایین الف) بعد از انتقال بر روی بستر عاق، ب) قبل از انتقال و بلافاصله بعد از رشد روی مس نازک. تصویر بزرگنمایی شده از الف، نشان دهنده یکی از جزایر چندلایه روی گرافن تک‌لایه است.

شکل ۳ (ج) طیف رامان گرافن رشد یافته را نشان می‌دهد که هر سه قله مربوط به گرافن را داراست. شدت قله‌ها نسبت به هم موید تک‌لایه بودن گرافن، ساختار کریستالی کم نقص و ناخالصی-های ناچیز قبل از انتقال است.



شکل۳: تصاویر میکروسکوپ الف) الکترونی گسیل میدانی و ب) نوری بازتابی، ج) طیف رامان گرافن رشد یافته به روش انباشت بخار شیمیایی در فشار پایین قبل از انتقال بر روی بستر عایق.

نتیجه گیری

گرافن به روش انباشت بخار شیمیایی در فشار پایین (LPCVD) روی مس خالص رشد داده شده و بر روی بستر عایق SiO_2/Si انتقال یافته است. مشخصه‌یابی الکتریکی گرافن رشد یافته تغییرات جریان-ولتاژ غیرخطی و کاهش مقاومت با افزایش جریان را نشان می‌دهد. این نتایج به‌همراه مشخصه‌یابی‌های سطح نشان می‌دهد گرافن رشد یافته از بستری وسیع به ضخامت تک‌لایه اتمی و جزایری کوچک به ضخامت چندلایه اتمی تشکیل شده است و ساختار کریستالی کم نقص و خالصی دارد. اما با فرایند انتقال به-واسطه پلیمر، دارای ناخالصی‌هایی می‌شود که در رفتار جریان ولتاژ تاثیر می‌گذارد. تغییر و بهینه‌سازی پارامترهای رشد و انتقال، در بهبود کیفیت گرافن و نزدیک شدن به ویژگی‌های گرافن تجاری بسیار موثر خواهد بود.

مرجع‌ها

[1] V.B. Mbayachi *et al*., Graphene synthesis, characterization and its applications: A review, Results Chem. **3**, 100163 (2021).
[2] S.-K. Son, *et al*., An Eco-Friendly, CMOS-Compatible Transfer Process for Large-Scale CVD-Graphene, Wiley Online Libr. **6** (2019) 1900084.
[3] I. Sharma *et al*., CVD growth of continuous and spatially uniform single layer graphene across the grain boundary of preferred (111) oriented copper processed by sequential melting–resolidification–recrystallization, Materials Chemistry Frontiers, **2**(6) 1137-1145 (2018).
[4] O. M. Van't Erve, *et al*., Graphene and monolayer transition-metal dichalcogenides: properties and devices, J. Mat. Res., **31**(7), 845-877 (2016).
[5] F.C. Rufino, *et al*., Definition of CVD Graphene Micro Ribbons with Lithography and Oxygen Plasma Ashing, Carbon Trends, **4**, 100056 (2021).
[6] A.S. Kazemi, *et al*., Support based novel single layer nanoporous graphene membrane for efficacious water desalination, Desalination, **451**, 148-159 (2019).
[7] N. Lisi, *et al*., Contamination-free graphene by chemical vapor deposition in quartz furnaces, Scientific reports, **7**(1), 1-11 (2017).
[8] M. Pourkhiabi, MSc. Thesis, IUST, Iran, 2022.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

نانوژنراتور پیزوالکتریک برپایه لایه جهت یافته ترجیحی تیتانات باریم

مرجان رجبی ؛ فاطمه طاوسی

پژوهشکده مواد پیشرفته و انرژی های نو، سازمان پژوهش‌های علمی و صنعتی ایران، تهران

چکیده

لایه تیتانات باریم بر زیرلایه شیشه با پوشش رسانای شفاف طی دو فرآیند هیدروترمال ایجاد شده است. پس از بررسی مورفولوژی، ساختار بلوری و خواص اپتیکی لایه با استفاده از میکروسکوپ‌های الکترونی روبشی و عبوری، پراش پرتو ایکس و طیف سنجی رامان، قطعه نانوژنراتور پیزوالکتریک ساخته و خواص الکتریکی آن ارزیابی شد. نتایج رشد جهت یافته ترجیحی تیتانات باریم با ساختار بلوری تتراگونال را در راستای صفحه (۰۱۱) نشان می دهند. بیشترین میانگین ولتاژ خروجی قطعات تولید شده تحت اعمال نیروی ۲/۶ نیوتن با فرکانس ۶ هرتز ۰/۸۶ میلی‌ولت می باشد.

واژه های کلیدی: تیتانات باریم، نانوژنراتور، پیزوالکتریک، هیدروترمال

Piezoelectric Nanogenator Based on Preferentially Oriented Barium Titanate Layer

Rajabi, Marjan; Tavosi, Fatemeh

Department of Advanced Materials and Renewable Energy, Iranian Research Organization for Science and Technology

Abstract

The barium titanate layer is synthsized on the glass substrate with a transparent conductive coating by using two step hydrothermal processes. After studying the morphology, crystal structure and optical propertiesby using scanning and transmission electron microscopes, X-ray diffractionmethod and Raman spectroscopy, a piezoelectric nanogenerator is fabricated and its electrical properties are evaluated. The results show the preferential orientation of barium titanate with tetragonal crystal structure in the direction of (011) plane. The maximum average output voltage of devices under the force of 2.6 N with a frequency of 6 Hz is 0.86 mV.

***Keywords**: $BaTiO_3$, Nanogenerator, Piezoelectric, Hydrothermal*
PACS No. ٦٨ ،٧٧

مقدمه

در دهه‌ای اخیر مخاطرات زیست محیطی و اثبات کارآیی فناوری‌های پیشرفته نظیر هوش مصنوعی و اینترنت اشیا در ارتقا کیفیت زندگی، فناوری‌های جمع‌آوری انرژی از منابع پیرامونی مانند تابش خورشید و انرژی مکانیکی حاصل از حرکات و جابجایی‌ها را برای تامین انرژی انواع سنسورها و سیستم‌های خودتوان برجسته و جالب توجه ساخته است [۱، ۲]. در سال ۲۰۰۶ وانگ و همکارانش استفاده از نانوسیم‌های پیزوالکتریک اکسیدروی برای تبدیل انرژی مکانیکی به الکتریسیته را گزارش نموده و از آن پس این قطعه که الکتریسیته را از منابع انرژی مکانیکی جمع‌آوری می‌کند نانوژنراتور نامیده شده است [۳]. در این حوزه از فناوری مانند سایر موارد مشابه، افزایش توان خروجی قطعه حائز اهمیت است که یکی راهکارهای آن جایگزین‌کردن نانومیله‌های اکسیدروی با دیگر نانوساختارهای پیزوالکتریک است. تیتانات باریم ($BaTiO_3$) ماده پروسکایت، فروالکتریک و زیست سازگاری است که در دمای اتاق مقدار ضریب d_{33} آن در بازه ۳۵۰ تا ۵۰۰ pC/N گزارش شده است [٤]. از مقایسه مقادیر ضریب d_{33} تیتانات باریم و اکسیدروی (۱۲ pC/N) انتظار می‌رود نانوژنراتور برپایه تیتانات باریم عملکرد مطلوبتری از نانوژنراتور اکسیدروی داشته باشد [۲، ۵].

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

در این مقاله تبدیل آرایه نانومیله‌های دی‌اکسید تیتانیوم به لایه تیتانات باریم به روش تبادل یون، ساخت نانوژنراتور پیزوالکتریک برپایه تیتانات باریم حاصل و ارزیابی خواص ماده و قطعه گزارش می‌شود.

روش ساخت

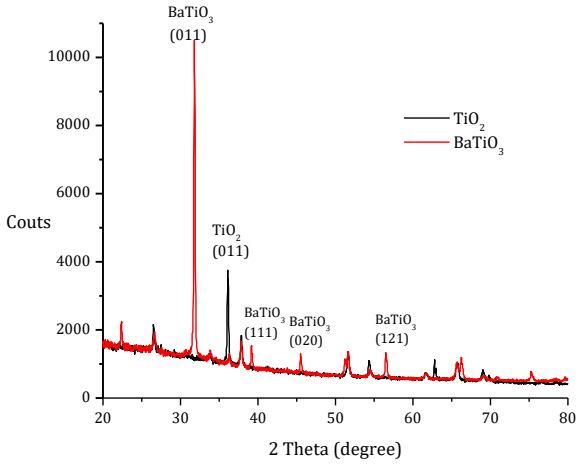
تیتانات باریم به روش نفوذ یون باریم در ساختار دی-اکسیدتیتانیوم طی دو مرحله فرآیند هیدروترمال تولید شده است. در نخستین فرآیند هیدروترمال نانومیله‌های دی‌اکسیدتیتانیوم بر زیرلایه شیشه با پوشش رسانای شفاف FTO رشد داده می‌شوند. در این فرآیند از ترکیب آب، اسید کلریدریک و تیتانیوم بوتوکساید ($C_{16}H_{36}O_4Ti$) با نسبت مشخص (۴۰ml: ۴۰ml: ۱/۳ml) استفاده شده است و واکنش به مدت ۴h در دمای ۱۸۰°C در اتوکلاو با آستر تفلون انجام شده است. پس از خاتمه فرآیند نخست اتوکلاو در دمای اتاق سرد شده است و نمونه ها با آب دیونیزه شسته شده و در اتمسفر محیط خشک شده اند. در فرآیند هیدروترمال دوم نانومیله‌های TiO_2 برای تبدیل به $BaTiO_3$ در اتوکلاو حاوی محلول یون باریم قرار داده می‌شوند. در این پژوهش از محلول آبی ۰/۲ مولار هیدروکسید باریم ۸ آبه استفاده شده است. مقدار محلول به میزانی است که ۶۰ درصد از محفظه تفلون اتوکلاو پر شود. واکنش نفوذ یون به مدت ۴h در دمای ۲۰۰°C انجام شده است. پس از آنکه اتوکلاو به دمای اتاق رسید، نمونه‌ها به ترتیب با محلول رقیق اسید کلریدریک، آب و اتانول شسته و به مدت ۳۰ دقیقه در دمای ۸۰°C خشک شده اند. در پایان نمونه‌ها به مدت ۱h در دمای ۵۰۰°C در کوره حرارت داده شده اند.

قطعه نانوژنراتور از دو قسمت تشکیل شده است که بوسیله اسپیسر به یکدیگر متصل می‌شوند. در یک سو لایه تیتانات باریم تشکیل شده بر لایه رسانای شفاف FTO بر زیرلایه شیشه قرار دارد که در تماس با لایه نازک طلا به ضخامت ۱۰۰ نانومتر که به روش اسپاترینگ بر لایه رسانای ITO بر زیرلایه پلی اتیلن ترفتالات نشانده شده است، قرار می‌گیرد. قطبی سازی نمونه ها در دمای ۸۰°C با اعمال اختلاف پتانسیل ۳۰ ولت میان الکترودها انجام شده است.

ریخت شناسی و ساختار بلوری با میکروسکوپ‌های الکترونی روبشی (FESEM; Mira2 TESCAN) و عبوری (TEM; PHILIPS CM300, 200kV) و پراش پرتو ایکس (X'Pert XRD; PRO MPD) مطالعه شده است. طیف سنجی رامان (Raman Microspectrometer) با برانگیختگی ۵۳۲nm انجام شده است. عملکرد نانوژنراتور نیز تحت اعمال نیروی مشخص ۲/۶ نیوتن با فرکانس ۶ هرتز بوسیله اسیلوسکوپ اندازه-گیری شده است.

بحث و بررسی نتایج

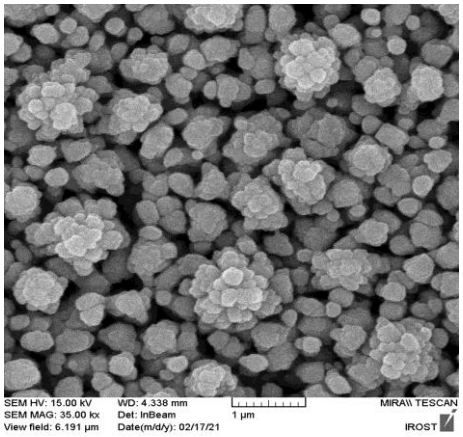
الگوی پراش پرتو ایکس آرایه نانومیله‌های TiO_2 که طی فرآیند فوق به تیتانات باریم تبدیل شده است به همراه الگوی XRD لایه $BaTiO_3$ حاصل، در شکل ۱ ارائه شده است. طبق کارت استاندارد پودر ۳۷۷۲-۰۰۱-۹۸ لایه تیتانات باریم ساختار بلوری تتراگونال دارد. در این کارت استاندارد قله‌های پراش متناظر با صفحه-های بلوری (۰۱۱) و (۱۱۰) به ترتیب با شدت‌های نسبی ۱۰۰ و ۸۵ درصد در زوایای ۳۱/۶۵۲ و ۳۱/۶۹۷ درجه همپوشانی دارند. قله الگوی پراش شکل ۱ در ۳۱/۶۲۰ درجه قرار دارد که با توجه به جهت گیری ترجیحی میله‌های تیتانیا در راستای صفحه (۰۱۱) که الگوی شکل‌گیری تیتانات باریم است این قله به صفحه (۰۱۱) نسبت داده شده است. مقادیر ثابت‌های شبکه a و c به ترتیب برابر ۳/۹۸۹ و ۴/۰۰۸ آنگستروم (c/a= ۱/۰۰۵) محاسبه شده‌اند که همخوانی خوبی با مقادیر استاندارد پودر دارند.



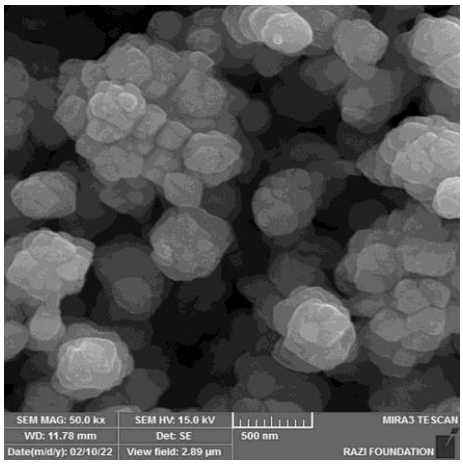
شکل ۱: الگوهای XRD آرایه نانومیله‌های TiO_2 و لایه $BaTiO_3$.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

شکل ۲ تصاویر FE-SEM از سطح لایه تیتانات باریم را با دو بزرگنمایی مختلف نشان می‌دهد. طبق تصاویر ساختار لایه به شکل ستون‌هایی از ذرات تیتانات باریم است. بیشترین فراوانی در آرایه دی‌اکسیدتیتانیوم اولیه به میله‌هایی با قطر ۵۰ تا ۱۱۰ نانومتر تعلق دارد. در حالیکه اندازه دانه ها در بازه ۱۰۰ تا ۲۰۰ نانومتر متغیر است. طبق تصاویر نمای جانبی ضخامت لایه تیتانات باریم تقریباً ۳ میکرومتر است.



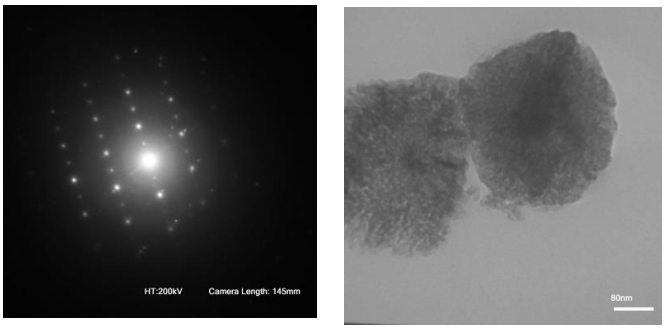
(الف)



(ب)

شکل ۲: تصاویر FE-SEM از سطح لایه تیتانات باریم با دو بزرگنمایی (الف) ۳۵ هزار برابر و (ب) ۵۰ هزار برابر.

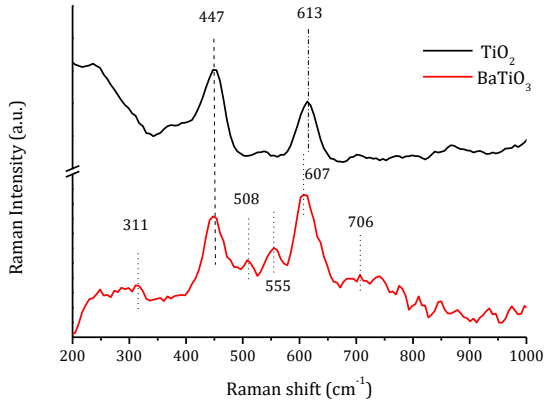
شکل ۳ تصویر HRTEM میدان روشن و الگوی پراش ناحیه منتخب (SAED) تیتانات باریم پس از جدا شدن از زیرلایه را نشان‌می‌دهد. طبق الگوی پراش محصول فرآیند تبدیل نانومیله‌های دی‌اکسیدتیتانیوم به تیتانیات باریم لایه‌ای از ذرات تک بلور است.



(ب) (الف)

شکل ۳: (الف) تصویر HRTEM و (ب) الگوی پراش SAED تیتانات باریم. طول خط شاخص در تصویر (الف) معرف ۸۰ nm است.

طیف‌های رامان نانومیله‌های دی اکسید تیتانیوم و تیتانات باریم در شکل ٤ ارائه و مقایسه شده‌اند. ساختار روتایل (تتراگونال) دی-اکسیدتیتانیوم که به گروه فضایی $P4_2/mnm$ متعلق است، با دو مولکول TiO_2 و ٦ اتم در هر سلول واحد، در مجموع ۱۵ مد ارتعاشی دارد. از میان مدهای ارتعاشی مدهای $A_{1g}+B_{1g}+B_{2g}+E_g$ چهار مد فعال رامان می‌باشند [٦]. در طیف رامان TiO_2 نوارهای رامان در نواحی ٤٤٧ و ٦١٣ cm^{-1} به ترتیب با مدهای ارتعاشی E_g و A_{1g} متناظرند. طیف‌های رامان تیتانات باریم در فاز روتایل ٤ نوار اصلی در موقعیت‌های ۲۵۰ $(A_1(TO))$، ۳۰۷ $(B_1, E(TO+LO))$، ۵۱۵ $(A_1(TO),E(TO))$ و ۷۱۵cm^{-1} $(A_1(LO), E(LO))$ را شامل می‌شود [۷]. همانگونه که مشاهده می‌شود در طیف $BaTiO_3$ نوارهای فعال در حوالی ۳۱۱، ٤٤٧، ۵۰۸، ۵۵۵، ٦۰۷ و ۷۰٦ cm^{-1} قرار دارند. مدهای ارتعاشی ۳۱۱، ۵۰۸ و ۷۰٦ cm^{-1} ساختار تتراگونال لایه تیتانات باریم را تایید می‌کنند.



شکل ٤: طیف‌های رامان نانومیله‌های دی‌اکسید تیتانیوم و لایه تیتانات باریم.

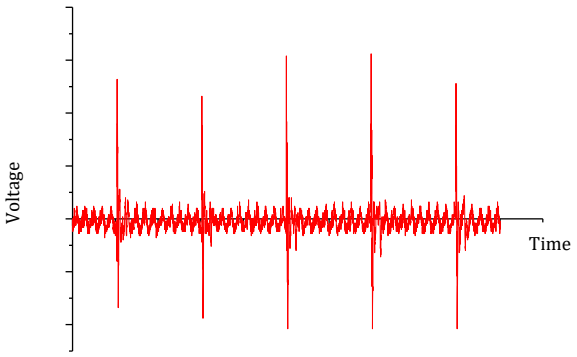
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

براساس نتایج حاصل از بررسی مورفولوژی، ساختار بلوری و سازوکار تبدیل دی‌اکسیدتیتانیوم به تیتانات باریم که در ادامه شرح داده می‌شود، شاید بتوان نوارهای رامان در حدود ٤٤٧ و cm^{-1} ٦٠٧ در طیف تیتانات باریم را به تشابه شبکه این دو ماده نسبت داد. تبدیل TiO_2 به $BaTiO_3$ طبق واکنش‌های زیر پیش می‌رود [٨]:

$$TiO_2 + 2H_2O \rightarrow Ti(OH)_{4aq} \quad (١)$$

$$Ba^{2+} + Ti(OH)_{4aq} \rightarrow BaTiO_3 + 2H^+ + H_2O \quad (٢)$$

در فرآیند تبدیل ابتدا دی‌اکسید تیتانیوم از سطح نانومیله‌ها در محلول آبی هیدروکسید باریم ٨ آبه حل شده و پس از واکنش با یون‌های باریم موجود در محلول، تیتانات باریم تشکیل و بر سطح نانومیله‌های موجود می‌نشیند. در شرایط مناسب غلظت محلول، دما و زمان این واکنش تا تبدیل کامل دی‌اکسید تیتانیوم به تیتانات باریم پیش می‌رود.



شکل ٥: ولتاژ خروجی نانوژنراتور پیزوالکتریک تحت اعمال نیرو.

شکل ٥ نمونه‌ای از خروجی نانوژنراتورهای پیزوالکتریک ساخته شده از لایه‌های تیتانات باریم فوق را در اثر اعمال نیروی ضربه ای و خروجی تقریباً ثابت قطعه را تخت ضربه‌های متوالی نشان می‌دهد. بیشترین خروجی این نانوژنراتورها تحت اعمال نیروی ٢/٦٥ نیوتن با فرکانس ٦ هرتز برابر ٠/٨٦ mV است.

نتیجه گیری

نتایج تبدیل موفق نانومیله‌های دی‌اکسیدتیتانیوم به لایه فروالکتریک تیتانات باریم را به روش تبادل یون، طی فرآیند هیدروترمال در دمای ٢٠٠ درجه سانتی‌گراد، نشان‌می‌دهند. ساختار بلوری تیتانات باریم جهت‌گیری ترجیحی در امتداد جهت ترجیحی رشد نانومیله‌های TiO_2 دارد. این لایه از دانه های تک بلوری که حول محور میله‌ها به هم چسبیده اند، تشکیل شده است. نانوژنراتور پیزوالکتریک حاصل از این لایه‌به طور مستقیم توانایی تولید الکتریسیته از نیروی مکانیکی را دارد و با بهبود طراحی قطعه ارتقا عملکرد آن امکانپذیر است.

سپاسگزاری

از همکاری جناب آقای دکتر باقرزاده و سرکار خانم مهندس ضیایی از مرکز تحقیقات مواد و فناوری‌های پیشرفته در نساجی دانشگاه صنعتی امیرکبیر که آزمون عملکرد نانوژنراتور در آنجا انجام شده است، صمیمانه قدردانی می‌شود.

مرجع‌ها

[1] H. Song, R. Venkatachalam, T. Nguyen, H. Bin Wu, P. Nguyen Tri (Editors), *Nanobatteries and Nanogenerators; Materials, Technologies and Applications*, Elsevier Inc. 2021.
[2] J. Brisco, S. Dunn, "Piezoelectric nanogenerators- a review of nanostructured piezoelectric energy harvesters" *Nano Energy* 14 (2015) 15-29.
[3] Z. L. Wang and J. Song, "Piezoelectric nanogenerators based on zinc oxide nanowire arrays" *Science* 312 (2006) 242-246.
[4] M. Acosta, N. Novak, V. Rojas, S. Patel, R. Vaish, J. Koruza, G. A. Rossetti, J. Rödel, "$BaTiO_3$-based piezoelectrics: Fundamentals, current status, and perspectives" *Applied Physics Reviews* 4 (2017) 041305.
[5] C. Sun, J. Shi, X. Wang, "Fundamental study of mechanical energy harvesting using piezoelectric nanostructures" *Journal of Applied Physics*, 108 (2010) 034309.
[6] U. Balachandran, N.G. Eror, "Raman spectra of titanium dioxide" *Journal of Solid State Chemistry*, 42 (1982) 276-282.
[7] A. Gajović, J. Vukajlović Pleština, K. Žagar, M. Plodinec, S. Šturm, Miran Čeh "Temperature-dependent Raman spectroscopy of BaTiO3nanorods synthesized by using a template-assisted sol-gel procedure" *Journal of Raman Spectroscopy*, 44 (2013) 412-420.
[8] Z. Zhou, H. Tang, H. A. Sodano, "Vertically Aligned Arrays of BaTiO3 Nanowires" ACS Applied Materials & Interfaces, 5 (2013) 11894-11899.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی اثر ناخالصی مس بر عملکرد آشکارسازی نور لایه متشکل از نانومیله‌های اکسید روی

حسینی، زهرا سادات [۱]؛ خدابنده لو، زهرا [۲]؛ مرتضی علی، عبدالله [۲*]؛ رجبی، مرجان [۳]

[۱]پژوهشکده فوتونیک و فناوری‌های کوانتومی، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی، تهران، ایران

[۲]دانشکده فیزیک و شیمی، دانشگاه الزهراء(س)، تهران، ایران

[۳]پژوهشکده مواد پیشرفته و انرژیهای نو، سازمان پژوهشهای علمی و صنعتی ایران، تهران، ایران

چکیده

هدف از این تحقیق بررسی اثر افزودن ناخالصی مس بر ریخت شناسی، ساختار بلوری و آشکارسازی نور فرابنفش در نانومیله‌های اکسید روی است. برای این منظور با استفاده از روش گرمابی نانومیله‌های اکسید روی رشد داده شده و سپس با درصدهای مختلفی از ناخالصی مس آلاییده می‌شوند. تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی افزایش قطر نانومیله‌ها و بالعکس کاهش رشد محوری آن‌ها را با حضور ناخالصی مس نشان دادند. در بررسی ساختار بلوری نمونه ها با طیف پراش پرتو ایکس، کاهش ثابت‌های شبکه مشاهده شد که می‌تواند ناشی از جایگزینی Zn^{2+} توسط Cu^{2+} با شعاع یونی کوچکتر باشد. عملکرد آشکارسازی تابش فرابنفش (nm ۳٦٥) نانومیله‌های خالص و آلاییده شده بر حسب پارامترهای مشخصه جریان نوری، حساسیت و زمان پاسخ در ساختار فلز/نیمه‌هادی/فلز مقایسه شدند. نتایج به دست آمده حاکی از آن است که حضور مس جریان های تاریک و روشن را کاهش می‌دهد که این کاهش در مورد جریان تاریک بیشتر است. جریان تاریک در ولتاژ بایاس ۵ V از $3/42\times10^{-6}$ A برای نمونه خالص به مقدارهای $6/43\times10^{-8}$ A و $1/12\times10^{-8}$ A به ترتیب برای نمونه‌های آلاییده با ۱٪ و ٤٪ مس می‌رسد. این کاهش منجر به افزایش قابل ملاحظه حساسیت از ۲۸ برای نمونه خالص به ٦۰۸ برای نمونه آلاییده با ۱٪ مس می گردد. همچنین آلایش با مس سرعت پاسخ نانومیله‌ها را به مقدار قابل توجهی بهبود می‌دهد به طوریکه از ۳۹۰/۳۷۰ s در نمونه خالص به ۱۲/۱۸۰ s در نمونه آلاییده با ۱٪ مس می‌رسد.

واژه های کلیدی: *نانومیله‌های اکسیدروی، آلایش مس، آشکارساز فرابنفش.*

Investigation the effect of Cu impurity on the photodetection performance of a ZnO nanorods film

Hosseini, Zahra Sadat [1], Khodabandelu, Zahra [2], Abdollah, Mortezaali [2*]; Rajabi, Marjan [3]

[1]*Photonics and Quantum Technologies Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute (NSTRI), Tehran, Iran*

[2]*Faculty of Physics and Chemistry, Alzahra University, Tehran, Iran*

[3]*Institute of Advanced Materials and Renewable Energies, Iranian Research Organization for Science and Technology (IROST), Tehran, Iran*

Abstract

The purpose of this study is investigating the effect of Cu impurity on morphology, crystalline structure, and UV photodetection of ZnO nanorods. For this purpose, ZnO nanorods were grown by hydrothermal method and then, doped with different percentages of Cu impurity. SEM images showed increase of the nanorod diameter, and conversely decrease in the growth along the c-axis direction. Upon analysis of crystalline structure by XRD pattern, decrease of the crystallite size was obtained which could be resulted from Zn^{2+} replacement by Cu^{2+} with smaller ionic radius. UV (365 nm) photodetection performances of pure and doped ZnO nanorods in terms of characteristic parameters of photocurrent, sensitivity, and response time in a metal/semiconductor/metal configuration were compared. The results showed that the presence of Cu results in decrease of photo and dark currents which is more for the dark current. Dark current at 5 V bias voltage reduces from 3.42×10^{-8} A to 6.43×10^{-8} and 1.12×10^{-8} for 1% and 4% Cu doped samples. This reduction results in a significant increase of sensitivity from 28 for the pure sample to 608 for the sample doped with 1% Cu. In addition, doping with Cu improves response time considerably, so that decreases from 390.370 s for the pure sample to the 12.180 s for the 1% Cu doped one.

***Keywords**: Zinc Oxide Nanorods, Cu doping, UV Photodetector.*

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

PACS No: 85

مقدمه

طی دهه گذشته، آشکارسازهای نور فرا بنفش (UV) به دلیل کاربردهای بالقوه در حوزه‌های مختلف شامل آشکارسازی شعله، مخابرات فضایی، پایش آلودگی و کاربردهای نظامی و غیره مورد توجه گسترده قرار گرفته‌اند [۱]. آشکارسازهای نور UV با پارامترهای مشخصه بهتر همانند حساسیت بالا، زمان پاسخ سریع، قابل اطمینان و کم هزینه برای کاربردهای عملی مطلوب ترند. اکسیدروی (ZnO) به عنوان یک نیمه هادی نوع n متداول با گاف نواری ۳/۳۷ eV و انرژی بستگی اکسایتونی بالا (۶۰ meV) در مقایسه با سایر نیمه هادی های با گاف نواری پهن می باشد [۲]. بنابراین به علت خواص منحصربه فردش از جمله سرعت سوق اشباع بالا، سختی در مقابل تابش قوی، راحتی تولید و قیمت پایین به عنوان یکی از مهم ترین مواد برای آشکارسازی UV در نظر گرفته می شود. اما اکسیدروی خالص به طور کلی عملکرد حسگری UV نسبتاً ضعیفی دارد که از غلظت حامل های نوع n زیاد و آهنگ بازترکیب سریع زوج های الکترون–حفره تولید شدهٔ نوری نشئت می گیرد. از راهکارهای پیشنهادی برای رفع این نقایص و در نتیجه اصلاح ویژگی های حسگری UV، وارد کردن افزودنی به اکسیدروی به صورت ناخالصی و یا ایجاد ساختارهای هیبریدی می باشد. مس (Cu) یکی از موثرترین ناخالصی ها برای افزایش عملکرد حسگری فرابنفش ZnO می باشد زیرا تلفیق Cu به ZnO می تواند غلظت حامل زمینه را کاهش دهد که سبب جریان تاریک کمتر می شود [۳]. به علاوه شعاع یون های Cu^{2+} (۷۳ pm) و Cu^{1+} (۷۷ pm) با Zn^{2+} (۷۴ pm) مشابه هستند و بنابراین برای جایگزینی با یون Zn^{2+} در مقایسه با سایر یون های ناخالصی مناسب تر هستند. لیکن نقش ناخالصی Cu در شبکه ZnO پیچیده می باشد که بر خواص حسگری اثر می گذارد. بنابراین درک بیشتر حامل بار القا شده نوری در ZnO آلاییده با Cu ضروری است.

روش های زیادی برای سنتز ZnO آلاییده با Cu همانند برآراستی باریکه مولکولی همراه شده با پلاسما (PA-MBE)، کندوپاش، رسوب لیزر پالسی (PLD) گزارش شده اند که نسبتاً فرایندهای کند و گرانی هستند. روش گرمابی[1] روشی آسان با هزینه پایین، سادگی فرایند، سازگار با محیط زیست و بازده بالا از محصولات ZnO آلاییده با مس معرفی شده است.

در این پژوهش، نانومیله های اکسید روی خالص و آلاییده با درصدهای متفاوتی از ناخالصی مس به روش گرمابی رشد داده شدند. پس از بررسی ریخت شناسی و کیفیت ساختار نمونه ها خواص آشکارسازی به تابش UV اندازه گیری و نقش ناخالصی مس مورد بررسی قرار گرفت.

مراحل تجربی

سنتز نانومیله های ZnO در طی یک فرایند دومرحله ای صورت می گیرد. در مرحله نخست دانه‌های جوانه زنی بر سطح زیرلایه های شیشه نشانده می شوند. سپس زیرلایه های دانه گذاری شده در محلول رشد ۰/۰۲ M متشکل از استات روی ($Zn(CH_3COO)_2$) و هگزامتیل تراآمین ($C6H_{12}N_4$, HMTA) به مدت ٤ ساعت در دمای ۹۰ درجه سانتیگراد قرار داده شدند. برای آلایش با Cu، مقادیر معینی استات مس ($Cu(CH_3COO)_2$) به محلول رشد اضافه شدند تا ZnO آلاییده با مس به دست آید. در پایان فرایند، نمونه‌ها با آب دیونیزه شستشو داده شدند و به مدت ۱ ساعت در آون با دمای ۱۰۰ درجه سانتی گراد قرار گرفتند. در انتها، عملیات بازپخت به مدت ۱ ساعت درون کوره در اتمسفر هوا با دمای ٤٥٠ درجه برای همه نمونه ها انجام شد.

ریخت شناسی، ساختار و عناصر تشکیل دهنده نمونه های رشد داده شده با میکروسکوپ الکترونی روبشی (Tescan MIRA II LMU MI0430976IR) مجهز به طیف سنجی انرژی پرتو ایکس (EDX)، طیف سنج پراش پرتو ایکس (Rigaku, Ultima IV) با تابش $CuK_{\alpha 1}$ (λ=1.541866 A°) مورد مطالعه قرار گرفتند. برای اندازه گیری های عملکرد آشکارسازی تابش UV، الکترودهای درون مرتبط شانه ای طلا با پهنای انگشت ۱۶۰ µm و فاصله µm ۱۲۰ به روش تبخیر حرارتی با استفاده از ماسک بر روی نمونه‌ها

[1] Hydrothermal

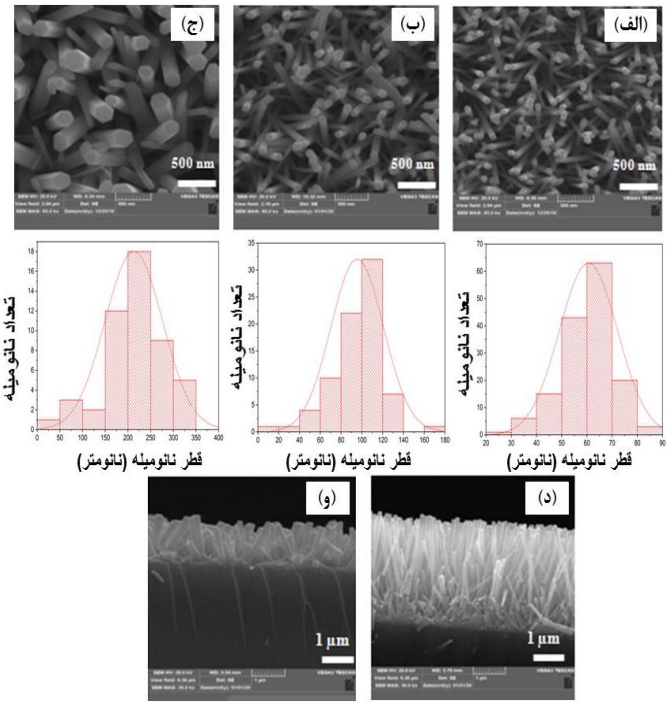
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

نشانده شدند. سپس در مدار اندازه‌گیری برای ثبت جریان الکتریکی در تاریکی و تحت تابش UV قرار داده شدند.

بحث و نتایج

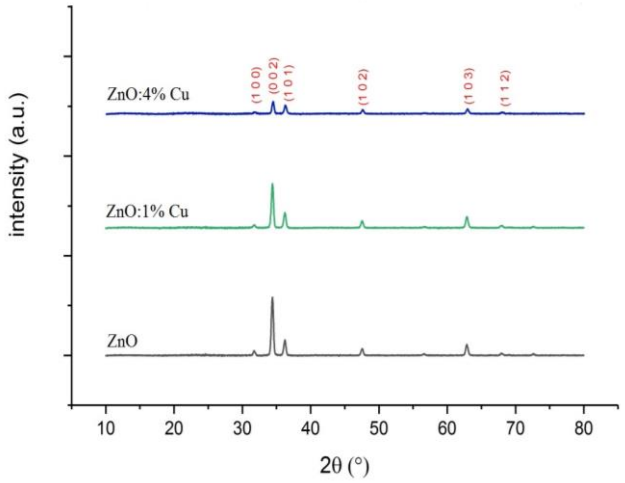
مشخصه یابی

شکل ۱ تصاویر SEM از سطح و نمای جانبی نمونه های خالص و آلاییده با ۱٪ و ٤٪ مس را به همراه نمودارهای توزیع اندازه شان نمایش می دهد. در این تصاویر رشد میله های نسبتاً عمود بر سطح زیرلایه دیده می شود. افزایش قطر میانگین نانومیله ها از حدود ۷۲ nm برای اکسیدروی خالص به حدود ۲٦۳ nm و کاهش طول میانگین آن‌ها از حدود ۳/٥ µm برای اکسیدروی خالص به حدود ۱/۳ µm برای اکسید روی آلاییده شده با ٤٪ Cu مشاهده می شود.



شکل ۱: تصاویر SEM از سطح نانومیله های ZnO الف) خالص و آلاییده با ب) ۱٪ Cu ج) ٤٪ Cu و مقطع عرضی د) خالص و) ٤٪ Cu

طیف XRD نشان می دهد که ZnO با فاز هگزاگونال ورتسایت (منطبق با کارت استاندارد ۰۵۱۰-۰۸۹-۰۱) بلوری شده است. پیک قوی در راستای صفحه (۰۰۲) نشان می‌دهد که همه نمونه‌ها دارای رشد مرجح در امتداد محور c و عمود بر زیرلایه هستند. نکته قابل توجه این است که هیچ فازی مربوط به بلور مس (Cu, CuO, Cu_2O) در لایه نازک‌های آلاییده شده با مس مشاهده نشده است. عدم وجود پیک به دلیل مقدار کم Cu می‌تواند باشد که قابل شناسایی توسط آنالیز XRD نبوده است.



شکل ۲: طیف XRD نانومیله های ZnO خالص و آلاییده شده با ۱٪ و ٤٪ Cu

جذب الکتروستاتیک انتخابی صفحه بلوری و پخش گرمایی یون های مس سازوکار حاکم بر تغییر ریخت شناسی می باشد. با حضور یون های مس در واکنش گرمابی، یون های مس کمپلکس هایی را شکل می‌دهند که می‌توانند بر صفحه بلوری (۰۰۰۲) ZnO جایگیری کنند و دسترسی واسطه‌های Zn فعال را محدود نمایند و در نتیجه مانع از رشد در راستای محور c شوند و در عوض رشد در راستای قطر انجام گیرد.

بررسی خواص آشکارسازی تابش UV

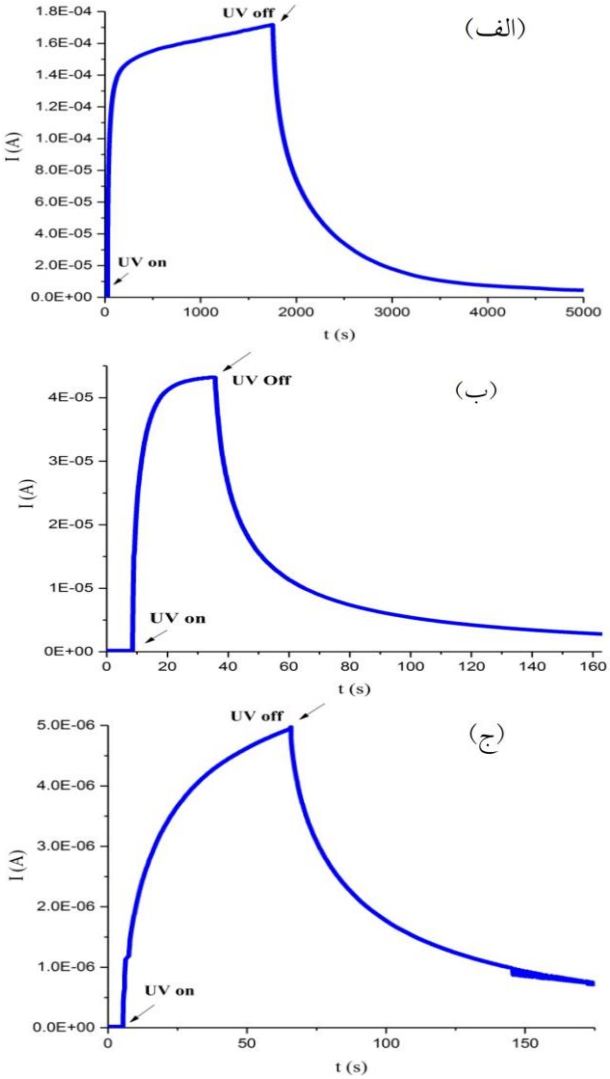
نتایج به دست آمده از اندازه گیری جریان الکتریکی نمونه ها در تاریکی و تحت تابش UV در جدول ۱ ارائه شده اند.

: جدول ۱: حساسیت، پاسخ دهی و زمان پاسخ نمونه ها

نمونه	حساسیت	پاسخ دهی (وات/آمپر)	زمان پاسخ (ثانیه)
ZnO	۲۸	۰/۳٦۷	۳۹۰/۳۷۰
ZnO:۱%Cu	٦۰۸	۰/۱٤۹	۱۲/۱۸۰
ZnO:۴%Cu	٤۰٥	۰/۰۱۷	۳۸/۷۸۰

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

همان طور که مشاهده می‌شود حساسیت آشکار ساز (I_{ph}/I_{dark}) با حضور Cu افزایش می‌یابد و زمان پاسخ کوتاه تر می‌گردد اما پاسخ دهی کوچکتر می‌شود. جریان نوری (I_{ph}) و تاریک (I_{dark}) در نانومیله‌های اکسیدروی آلاییده شده با Cu کوچک‌تر از نانومیله‌های اکسیدروی است. این کاهش بدان علت است که ناخالصی‌های Cu دراکسیدروی اغلب به عنوان پذیرنده عمیق برای به دام‌اندازی الکترون‌ها عمل می‌کنند [٤] در نتیجه مقاومت سطحی در شرایط تاریک برای نمونه‌های آلاییده شده با مس به طور چشمگیری از $۰/۱٤۲\times۱۰^{۷}$ ~ به $۰/۵\times۱۰^{۹}$ ~ اهم افزایش می‌یابد.



شکل ۳: منحنی جریان-زمان آشکاسازهای نور مبتنی بر نانومیله‌های اکسیدروی خالص و آلاییده با درصدهای مختلف ناخالصی Cu تحت تابش ۳٦۵ nm و ولتاژ ۵ V الف) ZnO ب) ZnO:۱٪Cu ج) ZnO:٤٪Cu

افزایش مقاومت در تاریکی نقش بسزایی در افزایش عملکرد آشکارساز در قالب اصلاح پارامتر حساسیت آن دارد به طوریکه حساسیت بیشتر در نمونه‌های آلاییده شده با Cu حاصل شده است. نمونه آلاییده شده با Cu ٤٪ همچنان حساسیت بزرگی در حدود ٤۰۵ را دارد اما به دلیل غلظت بالای Cu در این نمونه، جریان نوری کمترین مقدار را داراست و در نتیجه حساسیت و پاسخ دهی این نمونه که با جریان نوری متناسب هستند (I_{ph}/EA ؛ E شدت تابش و A مساحت موثر) کمتر از نمونه آلاییده شده با ۱٪Cu است. شکل ۳ منحنی های جریان-زمان آشکارسازها بر پایه نانومیله های ZnO خالص و آلاییده با Cu را نمایش می‌دهد. افزایش سرعت پاسخ با حضور ناخالصی Cu مشاهده می‌شود. کاهش در زمان پاسخ و بازگشت نشان می‌دهد که به دام افتادن و دفع الکترون‌ها توسط نقایص شکل گرفته مربوط به Cu سریع‌تر از جذب و واجذب مولکول‌های اکسیژن اتفاق می‌افتد [٤, ۵].

مراجع

[۱] W. Dai, X. Pan, C. Chen, S. Chen, W. Chen, H. Zhang, Z. Ye; "Enhanced UV detection performance using a Cu-doped ZnO nanorod array film"; *RSC Advances* **4** (2014) 31969-31972.

[۲] R. Sha, A. Basak, P.C. Maity, S. Badhulika; "ZnO nano-structured based devices for chemical and optical sensing applications"; *Sensors and Actuators Reports* **4** (2022) 100098.

[۳] C.-L. Hsu, Y.-D. Gao, Y.-S. Chen, T.-J. Hsueh; "Vertical p-type Cu-doped ZnO/n-Type ZnO homojunction nanowire-based ultraviolet photodetector by the furnace system with hotwire assistance"; *ACS Applied Materials & Interfaces* **6** (2014) 4277-4285.

[٤] J.V. Bellini, M.R. Morelli, R.H.G.A. Kiminami; "Electrical properties of polycrystalline ZnO:Cu obtained from freeze-dried ZnO+copper(II) acetate powders"; *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* **13** (2002) 485-489.

[۵] R. Shabannia; "A high photocurrent gain in UV photodetector based on Cu doped ZnO nanorods on PEN substrate"; *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* **29** (2018) 11646-11652.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مطالعه توپوگرافی و خواص ساختاری لایه‌های نازک مس- نیکل با ضخامت‌های مختلف نیکل

گودرزی، سمیرا؛ دلوجی، ولی

گروه فیزیک، دانشکده ملایر، دانشگاه ملایر، ملایر، ایران

چکیده

هدف از این تحقیق ساخت نانوذرات مس- نیکل با اندازه‌های مختلف، به منظور بررسی توپوگرافی و خواص ساختاری این نانو ذرات می‌باشد. بنابراین نانوذرات مس- نیکل در بستر لایه نازک کربنی به روش همزمان انباشت بخار شیمیایی و کندوپاش پلاسمای امواج رادیویی از هدف مس و نیکل در محیط گاز استیلن ساخته شد. ابتدا نانوذرات مس در بستر کربنی آماده شدند. سپس لایه نیکل با ضخامت‌های مختلف روی آن ساخته شد. توپوگرافی و خواص ساختاری به‌ترتیب توسط آنالیزهای میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM) و میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) بررسی شد.

کلمات کلیدی : *توپوگرافی، خواص ساختاری، ابعاد فراکتال، اندازه عرضی نانولوله‌ها ، چگالی اپتیکی.*

Study of topography and structural properties of Cu-Ni thin films with different thicknesses of Ni

Goudarzi, Samira; Dalouji, Vali

Department of Physics, Malayer University, Malayer, Iran

Abstract

The purpose of this research is to fabricate Cu-Ni nanoparticles of different sizes to investigate the topography and structural properties of these nanoparticles. Therefore, Cu-Ni nanoparticles in a carbon thin film were prepared by co-deposition of RF-sputtering and RF-PECVD. Samples containing Cu nanoparticle were grown on carbon substrate in attendance acetylene and then Ni layers with different thicknesses were grown over these Cu nanoparticles. Topography and structural properties were investigated by atomic force microscopy (AFM) and scanning electron microscopy (SEM), respectively.

***Keywords**: Topography, Structural properties, Fractal dimensions, Nanotubes lateral size, Optical density.*

مقدمه

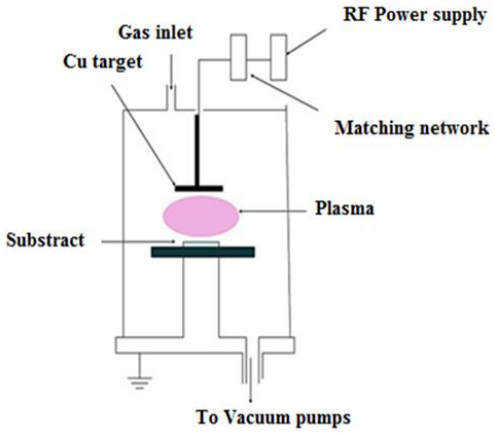
امروزه نانومواد نقش مهمی در شاخه های مختلف علوم مانند مواد، مهندسی و پزشکی ایفا می‌کنند [1،2]. یکی از پرکاربردترین مطالعات ساختاری لایه‌های نازک از مواد، تجزیه و تحلیل نتایج به‌دست آمده از تصاویر AFM است. مطالعه توپوگرافی سطح لایه ها و ارتباط آن با خواص الکتریکی لایه‌ها می‌تواند در بهبود عملکرد آنها مفید باشد. نانوذرات فلزی به دلیل کاربردهای منحصر به فرد خود در بسیاری از حیطه‌های صنعتی و پزشکی، موضوع تحقیقات گسترده‌ای بوده‌اند [3]. نانوذرات مس- نیکل به‌دلیل کاربرد بالقوه آنها در ضبط مغناطیسی نوری، دستگاه‌های ذخیره داده، اتصالات متقابل و مقاومت مغناطیسی غول پیکر مورد توجه قرار گرفته‌اند [4،5]. بسیاری از مطالعات مربوط به خواص فیزیکی لایه‌های نازک نیکل بر روی زیرلایه‌های گوناگون حاکی از این است که این خواص به طبیعت زیرلایه و شرایط لایه‌نشانی بستگی دارد. از خاصیت مغناطیسی نانوذرات مس- نیکل در اهداف بیولوژیکی به منظور انتقال دارو به بافت‌های بدن یا تشخیص اغلب توده‌های سرطانی استفاده نمود [6]. همچنین می‌توان از این لایه‌های فلزی در ساخت قطعات و کاربرد آنها در الکترونیک و مگنتواپتیک استفاده نمود [7]. در این مقاله، تأثیر ضخامت نیکل روی توپوگرافی سطح و خواص ساختاری لایه‌های نازک مس- نیکل مورد مطالعه قرار می‌گیرد.

جزئیات آزمایش

نانوذرات مس- نیکل با ضخامت‌های مختلف نیکل در بستر کربنی از دستگاه RF-PECVD با ترکیب دو روش کندوپاش و نشست بخار شیمیایی تهیه شدند. نمایی از محفظه لایه‌نشانی در شکل 1 نشان داده شده است. لایه‌نشانی در دمای اتاق صورت پذیرفت. عمل لایه‌نشانی در خلأ به این صورت بود که ابتدا نانوذرات مس بر روی شیشه و سیلیکون و سپس در مرحله بعدی، نانوذرات

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

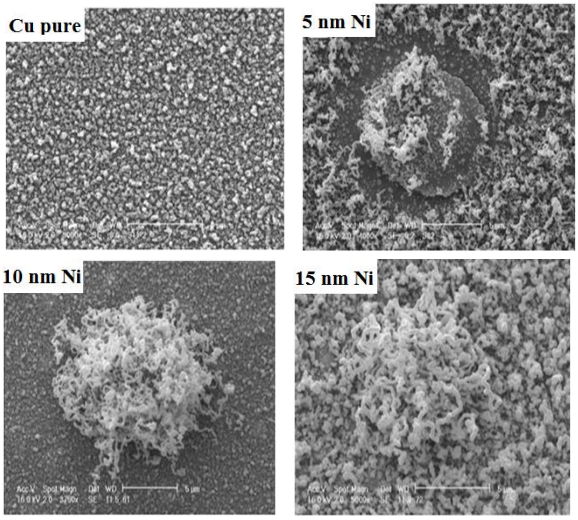
نیکل بر روی نانوذرات مس ساخته شده، لایه‌نشانی شد. مس در توان ثابت 200 وات، فشار اولیه 0/045 میلی‌بار و در مدت زمان 20 دقیقه ساخته شد. بعد از لایه‌نشانی مس روی زیرلایه‌ها از هدف نیکلی استفاده کردیم و نیکل را با اعمال توان 250 وات و فشار اولیه 0/025 میلی‌بار و در زمان‌های 2، 7 و 10 دقیقه بر روی لایه مس لایه‌نشانی کردیم. ضخامت لایه‌های مس و نیکل با استفاده از پروفیلومتر DEKTAK 3 اندازه‌گیری شد. با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM) به بررسی توپوگرافی نمونه‌های نیکل- مس پرداخته شد.



شکل 1 : نمای محفظه لایه‌نشانی

نتایج و بحث

تصاویر SEM نانولوله‌های کربنی رشد یافته روی نانوذرات مس خالص و مس- نیکل با ضخامت‌های مختلف نیکل در شکل 2 نشان داده شده است. همانطور که در تصاویر SEM نشان داده شده است، اندازه نانولوله‌ها برای لایه‌های نازک رسوب‌شده از ضخامت 5 به 15 نانومتر افزایش یافته و در 15 نانومتر، حداکثر مقدار را دارد. ویژگی قابل توجه ضخامت لایه‌های نیکل است که بر قطر نانولوله‌ها تأثیر می‌گذارد. با افزودن ضخامت نیکل، چگالی نانولوله‌های کربنی افزایش می‌یابد. مشاهده می‌شود که در تصاویر SEM، نانولوله‌های کربنی دارای قطرهای متفاوتی هستند و به طور کلی میانگین قطر نانولوله‌های رشد یافته با افزایش ضخامت لایه‌های نیکل افزایش می‌یابد. میانگین قطر نانولوله‌های کربنی رشد یافته روی فیلم‌ها برای لایه‌های مس- نیکل با ضخامت‌های 5، 10 و 15 نانومتر نیکل به‌ترتیب در حدود 10.3، 12.5 و 16.2 نانومتر به‌دست می‌آید.

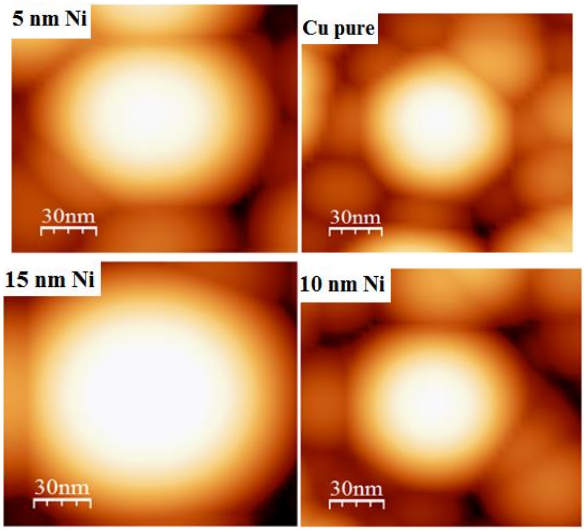


شکل 1 : تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) نانوذرات مس- نیکل با ضخامت‌های مختلف نیکل.

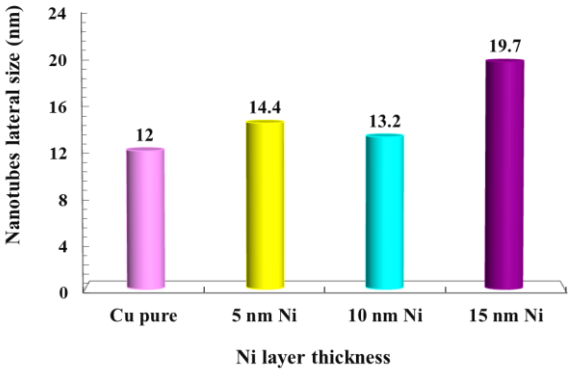
تصاویر میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM) در ابعاد 30nm×30nm به‌دست آمد. مورفولوژی سطح و اندازه متوسط نانوذرات لایه‌ها توسط AFM در حالت غیر تماسی به‌دست آمد و نتایج در شکل 3 نشان داده شده است. اندازه عرضی نانولوله‌های لایه‌های نازک را می‌توان با استفاده از تصاویر AFM تخمین زد. تغییرات اندازه‌های عرضی نانولوله سطوح فیلم‌ها در مقابل ضخامت لایه‌های مختلف نیکل در شکل 4 نشان داده شده است. مقادیر اندازه عرضی نانولوله‌ها برای لایه مس خالص و مس- نیکل با ضخامت‌های 5، 10 و15 نانومتر نیکل به‌ترتیب حدود 12، 14/4، 13/2 و 19/7 نانومتر است. لایه‌های رسوب‌شده با لایه‌ای از نیکل با ضخامت 15 نانومتر دارای حداکثر اندازه عرضی نانولوله‌ها هستند، اما لایه مس خالص دارای حداقل اندازه عرضی نانولوله است. تصاویر AFM نشان می‌دهد که نانولوله‌های سنتز شده بر روی لایه‌ها، اولاً دارای توزیع یکنواختی هستند که در سطح زیرلایه‌ها توزیع شده است و ثانیاً در مقیاس اندازه‌گیری، مقادیر میانگین قطر نانولوله‌های اندازه‌گیری شده نیز تقریباً یکسان به نظر می‌رسد. مشخص شد که اندازه نانولوله‌ها روی سطوح فیلم‌ها با افزایش ضخامت نیکل تا 5 نانومتر افزایش یافته، سپس از 5 به 10 نانومتر کاهش و از 10 به 15 نانومتر افزایش یافته است.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

اندازه نانولوله با نمودارهای گاوسی تغییر می‌کند، که تقریباً می‌تواند به دلیل تغییرات اندک در اندازه نانولوله‌ها با تغییر ضخامت لایه‌های نیکل باشد. با مقایسه تصاویر SEM و AFM متوجه می‌شویم که هر دو با یکدیگر سازگار هستند.



شکل 3 : تصاویر میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM) نانوذرات مس- نیکل با ضخامت‌های مختلف نیکل.



شکل4 : تغییرات اندازه عرضی نانولوله‌ها روی سطح لایه‌های نازک مس- نیکل با ضخامت‌های مختلف نیکل.

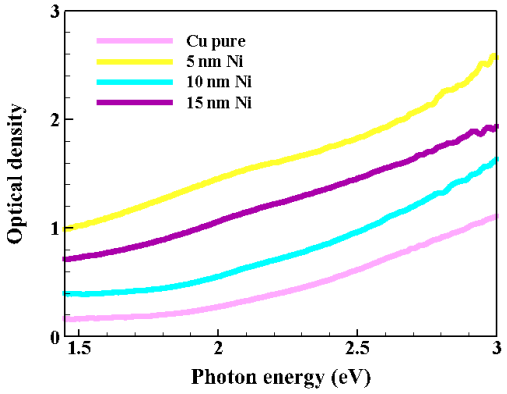
چگالی نوری D_{opt} لایه‌های نازک مس- نیکل را می توان از رابطه زیر به‌دست آورد [8]:

$$D_{opt} = \alpha t$$

t ضخامت لایه و α ضریب جذب است که از رابطه لامبرت بدست می‌آید. مطابق قانون لامبرت جذب یک نمونه به طور مستقیم با ضخامت (طول مسیر) متناسب است [9]:

$$\alpha = 2.303\ A/\ t$$

A جذب کنندگی لایه‌ها است. شکل 5 چگالی نوری نسبت به انرژی فوتون را برای لایه‌های نازک مس- نیکل با ضخامت‌های مختلف نیکل نشان می‌دهد. چگالی نوری برای لایه‌های نازک مس-نیکل بین 1/45 تا 3 الکترون ولت با شیب نسبتاً آهسته افزایش می‌یابد. چگالی نوری لایه‌های نازک با ضخامت 5 نانومتر نیکل دارای حداکثر مقدار است.



شکل 5 : چگالی نوری بر حسب انرژی فوتون برای لایه‌های نازک مس- نیکل با ضخامت‌های مختلف نیکل.

نمودار تغییر توان تراکم طیفی لایه‌ها (PSD) بر حسب فرکانس، از تصاویر میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM) استخراج شده است. مشاهده می‌شود که تمام نقطه‌های PSD از یک منطقه با فرکانس بالا تشکیل شده است. با توجه به تئوری مقیاس گذاری دینامیکی، برای سیستم با اندازه عرضی L، رابطه P(k) و فرکانس k به صورت زیر داده می‌شود [10]:

$$P(n) = 2L/N[<\sum_{i=1}^{N/2}(FFT\ (h(x_i))^2>_y+<\sum_{i=1}^{N/2}\Sigma\ (FFT(h(y_j))^2>_x]$$

جایی که FFT تبدیل فوریه بین مکان های حقیقی و دو طرفه است:

$$P(k) \propto k^{-\beta}$$

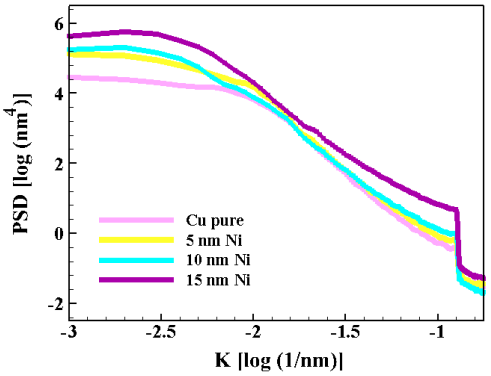
هرکجا β است، به عنوان شیب نمودار log–log درPSD فرکانس بالا محاسبه می‌شود. ابعاد فراکتال D_f از حل β شیب نمودار log–log بدست می‌آید [11]:

$$D_f = 4 + \beta/2$$

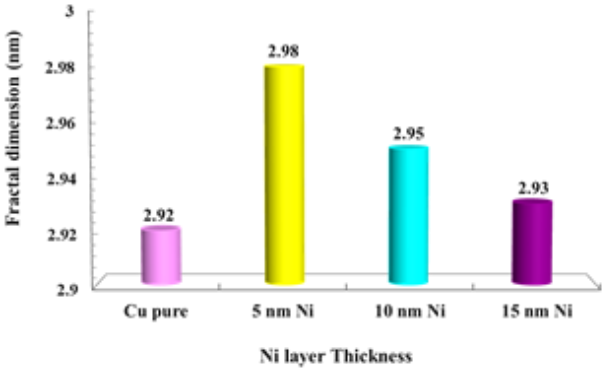
شکل 6 تغییرات توان تراکم طیفی لایه‌ها بر حسب فرکانس را برای لایه‌های نازک مس- نیکل با ضخامت‌های مختلف نیکل نشان می‌دهد. توان تراکم طیفی در کلیه لایه‌ها، تغییرات توان جریان

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

معکوس را به ویژه در ناحیه فرکانس بالا نشان می‌دهد که وجود اجزای فراکتالی را در توپوگرافی های برجسته نمایان می‌کند. این مقادیر نسبی بی نظمی‌های سطح را در مقیاس‌های مختلف سطح تعیین می‌کند. با افزایش ضخامت لایه‌های نیکل، عملکرد توان تراکم طیفی افزایش می‌یابد. شکل 7 تغییرات ابعاد فراکتال را نسبت به ضخامت لایه نیکل نشان می‌دهد. مقادیر ابعاد فراکتالی برای لایه‌های مس خالص و لایه‌های مس- نیکل با ضخامت‌های 5، 10 و 15 نانومتر نیکل به ترتیب 2/92، 2/98، 2/95 و 2/93 نانومتر برآورد شد. بنابراین با افزایش ضخامت لایه نیکل تا 5 نانومتر، ابعاد فراکتالی فیلم‌ها افزایش می‌یابد و سپس بیش از 5 نانومتر کاهش می‌یابد.



شکل 6 : تغییرات توان تراکم طیفی بر حسب فرکانس برای لایه‌های نازک مس- نیکل با ضخامت‌های مختلف نیکل.



شکل 7 : ابعاد فراکتال لایه‌های نازک مس- نیکل با ضخامت‌های مختلف نیکل.

نتیجه‌گیری

لایه شامل نانو ذرات مس آماده شد. سپس لایه نیکل با ضخامت- های مختلف روی آن ساخته شد. در تصاویر SEM، نانولوله‌های کربنی دارای قطرهای متفاوتی هستند و به طور کلی میانگین قطر نانولوله‌های رشد یافته با افزایش ضخامت لایه‌های نیکل افزایش می‌یابد. مورفولوژی سطح و اندازه متوسط نانوذرات لایه‌ها توسط AFM در حالت غیر تماسی به‌دست آمد. چگالی نوری لایه‌های نازک با ضخامت 5 نانومتر نیکل دارای حداکثر مقدار است. با افزایش ضخامت لایه‌های نیکل، عملکرد توان تراکم طیفی افزایش می‌یابد. لایه مس- نیکل با ضخامت 15 نانومتر نیکل و لایه مس خالص به ترتیب دارای حداکثر و حداقل مقادیر ابعاد فراکتال هستند.

مرجع‌ها

[1] Dejam, Laya, S. Mohammad Elahi, Heydar Honarvar Nazari, Hossein Elahi, Shahram Solaymani, and Atefeh Ghaderi. "Structural and optical characterization of ZnO and AZO thin films: the influence of post-annealing." *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* 27, no. 1 (2016): 685-696.
[2] Țălu, Ștefan, Miroslaw Bramowicz, Slawomir Kulesza, Azizollah Shafiekhani, Atefeh Ghaderi, Fatemeh Mashayekhi, and Shahram Solaymani. "Microstructure and tribological properties of FeNPs@ aC: H films by micromorphology analysis and fractal geometry." *Industrial & Engineering Chemistry Research* 54, no. 33 (2015): 8212-8218.
[3] Lei, Yong, and Wai-Kin Chim. "Highly ordered arrays of metal/semiconductor core− shell nanoparticles with tunable nanostructures and photoluminescence." *Journal of the American Chemical Society* 127, no. 5 (2005): 1487-1492.
[4] Du, Chunsheng, and Ning Pan. "CVD growth of carbon nanotubes directly on nickel substrate." *Materials Letters* 59, no. 13 (2005): 1678-1682.
[5] Mozaffari, Nastaran, Shahram Solaymani, Amine Achour, Slawomir Kulesza, Miroslaw Bramowicz, Negin Beryani Nezafat, Ștefan Țălu, Niloofar Mozaffari, and Sahar Rezaee. "New insights into SnO2/Al2O3, Ni/Al2O3, and SnO2/Ni/Al2O3 composite films for CO adsorption: building a bridge between microstructures and adsorption properties." *The Journal of Physical Chemistry C* 124, no. 6 (2020): 3692-3701.
[6] Sousa, Marcelo Henrique, Francisco Augusto Tourinho, Jérôme Depeyrot, Geraldo José da Silva, and Maria Cristina FL Lara. "New electric double-layered magnetic fluids based on copper, nickel, and zinc ferrite nanostructures." *The Journal of Physical Chemistry B* 105, no. 6 (2001): 1168-1175.
[7] Singh, Surendra, Saibal Basu, and S. K. Ghosh. "Structure and morphology of Cu/Ni film grown by electrodeposition method: A study of neutron reflectivity and AFM." *Applied Surface Science* 255, no. 11 (2009): 5910-5916.
[8] Hassanien, Ahmed Saeed, and Alaa A. Akl. "Effect of Se addition on optical and electrical properties of chalcogenide CdSSe thin films." *Superlattices and Microstructures* 89 (2016): 153-169.
[9] Dalouji, Vali, Samira Goudarzi, and Shahram Solaymani. "The optical density and topography characterizations of MWCNTs on Ni-Cu/a-C: H substrates with different copper percentage." *Microscopy Research and Technique* 84, no. 6 (2021): 1205-1211.
[10] Rahimi, N., V. Dalouji, and A. Souri. "Studying the optical density, topography, and structural properties of CZO and CAZO thin films at different annealing temperatures." *Advanced Ceramics Progress* 6, no. 2 (2020): 17-23.
[11] Dalouji, Vali. "Power spectral densities and polaron hopping conduction parameters in carbon films embedded by nickel nanoparticles." *Optik* 148 (2017): 1-7.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تأثیر درصد مس روی چگالی اپتیکی و خواص ساختاری سطح لایه‌های نازک نیکل- مس با درصد متفاوت مس

گودرزی، سمیرا؛ دلوجی، ولی

گروه فیزیک، دانشکده ملایر، دانشگاه ملایر، ملایر، ایران

چکیده

نانوذرات نیکل- مس در بستر لایه نازک کربنی به روش همزمان انباشت بخار شیمیایی و کندوپاش پلاسمای امواج رادیویی از هدف مس و نیکل در محیط گاز استیلن رشد داده شد. ابتدا نانوذرات نیکل در بستر کربنی آماده شدند. سپس لایه مس با درصدهای مختلف روی آن ساخته شد. لایه نشانی روی شیشه و سیلیکون در دمای اتاق انجام شد. با استفاده از آنالیزهای میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) و میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM) به بررسی نانولوله‌های کربنی، پرداخته شد. همچنین اندازه عرضی نانو ذرات از داده‌های AFM به‌دست آمد.

کلمات کلیدی: *لایه‌های نازک نیکل- مس، میکروسکوپ نیروی اتمی، اندازه عرضی نانو ذرات، چگالی اپتیکی، منطقه تحمل.*

The effect of Cu percentage on optical density and structural properties of Ni-Cu thin films with different Cu percentage

Goudarzi, Samira; Dalouji, Vali

Department of Physics, Malayer University, Malayer, Iran

Abstract

Ni-Cu nanoparticles on carbon thin films were prepared using acetylene gas and Ni and Cu targets. First, nickel nanoparticles were prepared in a carbon substrate. Then a layer of copper with different percentages was made on it. The deposition was performed on glass and silicon at room temperature. Carbon nanotubes (CNTs) were characterized using scanning electron microscopy (SEM) and atomic force microscopy (AFM) analysis. As well as, the lateral size of nanoparticles was obtained from AFM data.

***Keywords**: Ni-Cu thin films, AFM, Lateral size of nanoparticles, Optical density, Bearing area.*

مقدمه

اهمیت پدیده‌های فیزیکی که در لایه‌های نازک رخ می‌دهد، اولاً ناشی از چشم انداز گسترده کاربرد لایه‌های نازک در عمل (مهندسی با فرکانس فوق العاده بالا، الکترونیک نوری، میکروالکترونیک و غیره) و دوم، امکان به‌دست آوردن اطلاعات مورد نیاز برای حل است. برخی مسائل اساسی در فیزیک حالت جامد و سطح لایه‌های نازک Ni/Cu موضوع بسیاری از مطالعات بوده است. چندین ویژگی جالب از سیستم Ni/Cu گزارش شده است [۱-٤]. اخیراً توجه به لایه‌هایی با ضخامت در محدوده نانومتر معطوف شده است. مشخص شده است که خواص فیزیکی این لایه‌های نازک به روش و شرایط رسوب، به ضخامت، ماهیت بستر و لایه زیرین بستگی دارد. نانولوله‌های کربنی به دلیل ساختار خاص، خواص الکترونیکی و مکانیکی فوق‌العاده و کاربردهای بالقوه‌شان توجه زیادی را به خود جلب کرده‌اند [٥،٦]. مس یکی از متداول ترین فلزات رسانا است که به دلیل رسانایی حرارتی و الکتریکی عالی می‌تواند در بسیاری از کاربردها استفاده شود. لایه-های ترکیبی نیکل- مس ساختار جالبی دارند، زیرا Ni و Cu دارای ساختار fcc بوده و ناهماهنگی شبکه‌ای آنها کم و در حدود ۲/۵ ٪ می‌باشد [۷]. از خاصیت مغناطیسی نانو ذرات نیکل- مس در اهداف بیولوژیکی به منظور انتقال دارو به بافت‌های بدن یا تشخیص اغلب توده‌های سرطانی استفاده می‌شود [۸].

جزئیات آزمایش

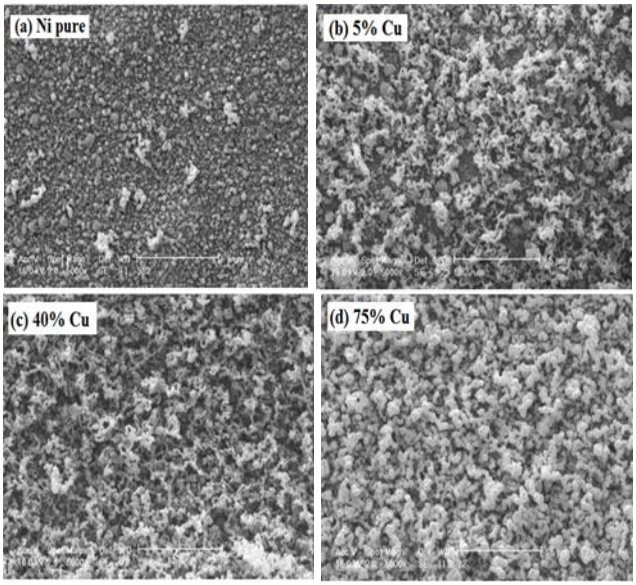
در این مطالعه، نانوذرات نیکل- مس در بستر کربنی از دستگاه RF-PECVD با ترکیب دو روش کندوپاش و نشست بخار شیمیایی تهیه شدند. در این سیستم از دو پمپ روتاری و دیفیوژن

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

جهت خلأ کردن محفظه استفاده شد. محفظه شامل دو الکترود با مساحت‌های مختلف می‌باشد. الکترود کوچکتر (الکترود هدف مس و نیکل) به شعاع ۷/۵ سانتی‌متر است که به منبع RF متصل است و الکترود دیگر به شعاع ۱۳ سانتی‌متر از طریق بدنه محفظه به زمین متصل است. فاصله بین الکترودها، ۵ سانتی‌متر می‌باشد. فرکانس منبع ۱۳/۵۶ مگا هرتز است که به صورت خازنی به الکترودها اعمال می‌شود. زیرلایه‌های شیشه و سیلیکون روی الکترود متصل به زمین گذاشته شد. محفظه با استفاده از پمپ‌های روتاری و دیفیوژن تا فشار 10^{-5} میلی بار قبل از لایه‌نشانی خلأ شد و سپس فشار محفظه با گاز استیلن به فشار لایه‌نشانی مورد نظر از ۰/۰۲۵ تا ۰/۰۴۵ میلی‌بار ر سید و توان RF اعمال شد. عمل لایه‌نشانی در دمای اتاق صورت پذیرفت. عمل لایه‌نشانی در خلأ به این صورت بود که ابتدا نانوذرات نیکل بر روی شیشه و سیلیکون و سپس در مرحله بعدی، نانوذرات مس بر روی نانوذرات نیکل ساخته شده، لایه‌نشانی شد. نیکل در توان ثابت ۲۰۰ وات، فشار اولیه ۰/۰۴۵ میلی‌بار و در مدت زمان ۲۰ دقیقه ساخته شد. بعد از لایه‌نشانی نیکل روی زیرلایه‌ها از هدف مسی استفاده کردیم و مس را با اعمال توان ۲۵۰ وات و فشار اولیه ۰/۰۲۵ میلی‌بار و در زمان‌های ۲، ۷ و ۱۰ دقیقه بر روی لایه نیکل لایه‌نشانی کردیم. ضخامت لایه‌های مس و نیکل با استفاده از پروفیلومتر DEKTAK 3 اندازه‌گیری شد. با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM) به بررسی توپوگرافی نمونه-های نیکل- مس پرداخته شد و از ابزار تصویربرداری میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) برای مشخصه یابی نانولوله‌های بدست آمده استفاده شد.

نتایج و بحث

میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) نوعی میکروسکوپ الکترونی است که با اسکن سطح با پرتو متمرکز الکترون، تصاویری از نمونه تولید می‌کند. شکل ۱ تصاویر SEM سطح نانوذرات نیکل و نیکل- مس را بعد از عملیات لایه‌نشانی جهت فرآیند رشد نانولوله‌های کربنی نشان می‌دهد. از تصاویرSEM می‌توان دریافت که با افزودن نانو ذات مس با درصدهای متفاوت، چگالی نانولوله‌های کربنی افزایش می‌یابد. یک ویژگی قابل توجه، درصد میزان مس است که بر قطر نانولوله‌ها تأثیر می‌گذارد. مشاهده می‌شود که با افزایش درصد مس لایه‌های نازک، میانگین قطر نانولوله‌های کربنی رشد یافته افزایش می‌یابد. نتایج آنالیز SEM نشان داد که افزودن نانوذرات مس به عنوان بستری از نانوذرات کاتالیستی نیکل، در رشد نانولوله‌های کربنی، عامل موثری بوده است.

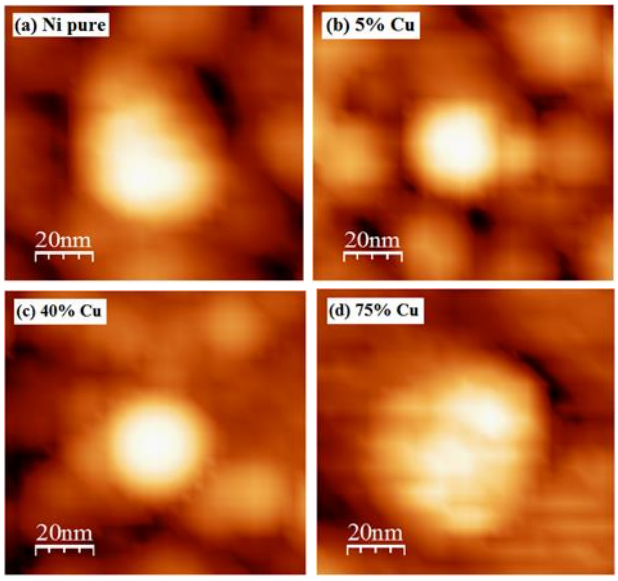


شکل۱ : تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) نانوذرات نیکل- مس.

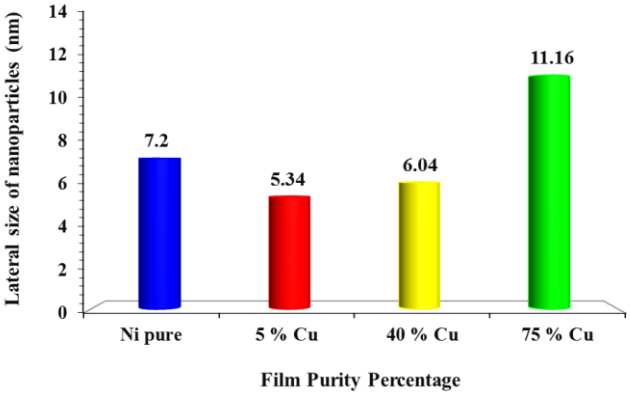
تصاویر میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM) نانو ذرات روی سطح لایه‌های نازک در شکل ۲ نشان داده شده است. میکروسکوپ‌های نیروی اتمی گروهی از میکروسکوپ‌های کاوشگر روبشی هستند که علاوه بر امکان تصویربرداری در محیط غیر خلأ، می‌توانند نمونه‌های بیولوژیکی و غیر القایی نیز بگیرند [۹،۱۰]. با تصاویر میکروسکوپ نیروی اتمی می‌توان اندازه عرضی نانو ذرات روی سطح نمونه را تخمین زد و از این تصاویر می‌توان برای توضیح بسیاری از ویژگی‌های فیزیکی استفاده کرد [۱۱،۱۲]. مقادیر اندازه عرضی نانو ذرات نیکل بدون مس و نانوذرات نیکل حاوی ۵٪، ۴۰٪ و ۷۵٪ مس به ترتیب حدود ۷/۲، ۵/۳۴، ۶/۰۴ و ۱۱/۱۶ نانومتر برآورد شده است. نمودار تغییرات اندازه عرضی نانوذرات

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

روی سطح لایه‌ها در شکل ۳ برای لایه‌های نازک نیکل- مس با درصدهای متفاوت مس نشان داده است، جایی که اندازه عرضی نانوذرات با استفاده از تصاویر میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM) به صورت تقریبی محاسبه شده است. برای فیلم‌های با ٪۷۵ مس، اندازه عرضی نانوذرات دارای جهش بزرگ است، در حالی که برای فیلم‌های با ٪۵۰ و ٪۴۰ مس با شیب کم در حال تغییر است. نانوذرات تقریباً کروی هستند و با افزایش درصد مس از حالت کروی تغییر شکل می‌دهند. بنابراین، مشخص شد که تغییرات اندازه عرضی نانوذرات بر روی سطح لایه‌ها با افزایش درصد مس افزایش می‌یابد.

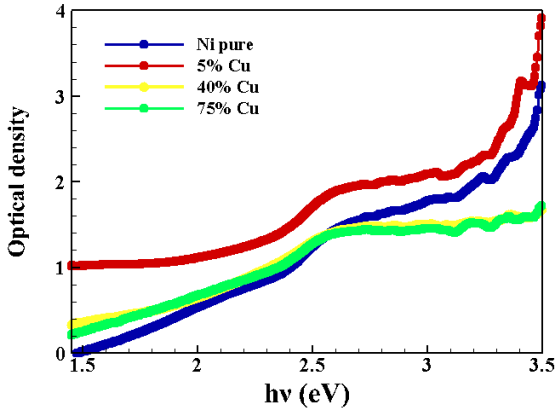


شکل۲ : تصاویر میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM) نانوذرات نیکل- مس.



شکل۳ : نمودار تغییرات اندازه عرضی نانو ذرات روی سطح لایه‌های نازک نیکل- مس با درصدهای متفاوت مس.

چگالی نوری فیلم‌ها (D_{opt})، یا جذب، بیان کمی از نوری است که توسط مواد جذب می‌شود. تخمین چگالی نوری یک روش رایج برای تعیین کمیت پارامترهای مهم مختلف مانند غلظت لایه نازک و تغییرات مورفولوژی فیلم است. چگالی نوری متناسب با ضریب جذب، α فیلم و ضخامت آن، t است. جایی که می‌توان آن را با استفاده از معادله ساده ارزیابی کرد $D_{opt} = \alpha t$ [۱۳]. ضخامت لایه‌های نازک از طریق پروفیلومتر DEKTAK 3 اندازه گیری می‌شود و در این کار ضخامت ثابت می‌باشد. در نتیجه، چگالی نوری (D_{opt})، لایه‌های نازک موجود را می‌توان به راحتی تخمین زد. شکل ٤ تغییرات چگالی نوری لایه‌ها را برای لایه‌های نازک نیکل- مس با درصد متفاوت مس در مقابل انرژی فوتون نشان می‌دهد. با افزایش درصد مس فیلم‌ها تا ٪۵، چگالی نوری فیلم‌ها افزایش یافته و سپس از ٪۵ به ٪۷۵ چگالی نوری فیلم‌ها کاهش می‌یابد. بنابراین، فیلم‌های رسوب‌شده با ٪۵ مس دارای حداکثر مقدار چگالی نوری در تمام محدوده‌های انرژی هستند.

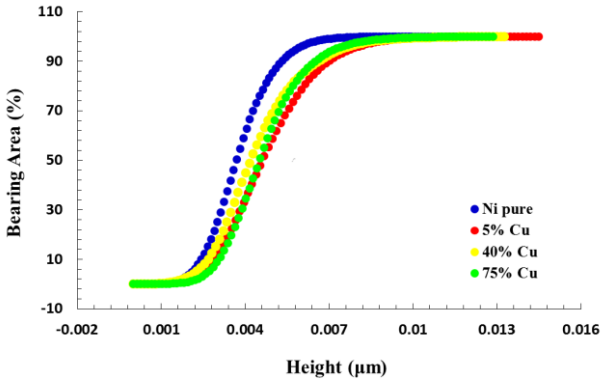


شکل٤ : نمودار **چگالی اپتیکی بر حسب انرژی** برای لایه‌های نازک نیکل- مس با درصدهای متفاوت مس.

شکل ۵ منطقه تحمل نسبت به ارتفاع را برای لایه‌های نازک نیکل- مس با درصد متفاوت مس نشان می‌دهد. در واقع نشان دهنده میزان خلأ پوششی صفر (حفره، انحنای پایین نمودار) و تک لایه (انحنای بالای نمودار) و ایزوله (ما بین حفره و تک لایه) لایه‌ها می‌باشد. برای نانولوله‌های کربنی تهیه شده با استفاده از نانوذرات نیکل حاوی ٪۵، ٪۴۰ و ٪۷۵ مس میزان پوشش حفره کمتر از ٪۱۰

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

و میزان تک لایه حدود ۹۵٪ است که میزان ۹۰٪ ایزوله (ما بین حفره و تک لایه) می‌باشد.



شکل۵ : منطقه تحمل نسبت به ارتفاع **برای لایه‌های نازک نیکل- مس با درصدهای متفاوت مس.**

نتیجه‌گیری

تصاویر میکروسکوپ نیروی اتمی در ابعاد 20nm×20nm بدست آمد. تمام اندازه گیری‌های نمونه‌ها در دمای اتاق انجام شد. نتایج آنالیز SEM نشان داد که با افزایش درصد مس لایه‌های نازک، میانگین قطر نانولوله‌های کربنی رشد یافته افزایش می یابد. مقادیر اندازه عرضی نانو ذرات نیکل بدون مس و نانوذرات نیکل حاوی ۵٪، ٤٠٪ و ۷۵٪ مس به ترتیب حدود ۷/۲، ٥/٣٤، ٦/٠٤ و ١١/١٦ نانومتر به‌دست آمد. نانوذرات تقریباً کروی هستند و با افزایش درصد مس از حالت کروی تغییر شکل می‌دهند. با افزایش درصد مس فیلم‌ها تا ۵٪، چگالی نوری فیلم‌ها افزایش یافته و سپس از ۵٪ به ۷۵٪ چگالی نوری فیلم‌ها کاهش می‌یابد. برای نانولوله‌های کربنی تهیه شده با استفاده از نانوذرات نیکل حاوی ۵٪، ٤٠٪ و ۷۵٪ مس میزان پوشش حفره کمتر از ۱۰٪ و میزان تک لایه حدود ۹۵٪ است که میزان ۹۰٪ ایزوله (ما بین حفره و تک لایه) می‌باشد.

مرجع‌ها

[۱] Ha, K., M. Ciria, R. C. O'Handley, P. W. Stephens, and S. Pagola. "X-ray study of strains and dislocation density in epitaxial Cu/Ni/Cu/Si (001) films." *Physical Review B* 60, no. 19 (1999): 13780.
[۲] Nacereddine, C., A. Layadi, A. Guittoum, S-M. Cherif, T. Chauveau, D. Billet, J. Ben Youssef, A. Bourzami, and M-H. Bourahli. "Structural, electrical and magnetic properties of evaporated Ni/Cu and Ni/glass thin films." *Materials Science and Engineering: B* 136, no. 2-3 (2007): 197-202.
[۳] Bi, Xiaoyang, Xiaowu Hu, and Qinglin Li. "Effect of Co addition into Ni film on shear strength of solder/Ni/Cu system: experimental and theoretical investigations." *Materials Science and Engineering: A* 788 (2020): 139589.
[۴] Guevara, Laura, Roger Welsh, and Mark A. Atwater. "Parametric effects of mechanical alloying on carbon nanofiber catalyst production in the Ni-Cu system." *Metals* 8, no. 4 (2018): 286.
[۵] Mendoza, E., S. J. Henley, C. H. P. Poa, G. Y. Chen, C. E. Giusca, A. A. D. T. Adikaari, J. D. Carey, and S. R. P. Silva. "Large area growth of carbon nanotube arrays for sensing platforms." *Sensors and Actuators B: Chemical* 109, no. 1 (2005): 75-80.
[۶] Arribas, Alberto Sánchez, Esperanza Bermejo, Manuel Chicharro, Antonio Zapardiel, Guillermina L. Luque, Nancy F. Ferreyra, and Gustavo A. Rivas. "Analytical applications of a carbon nanotubes composite modified with copper microparticles as detector in flow systems." *Analytica chimica acta* 577, no. 2 (2006): 183-189.
[۷] Barshilia, Harish C., and K. S. Rajam. "Characterization of Cu/Ni multilayer coatings by nanoindentation and atomic force microscopy." *Surface and Coatings Technology* 155, no. 2-3 (2002): 195-202.
[۸] Sousa, Marcelo Henrique, Francisco Augusto Tourinho, Jérôme Depeyrot, Geraldo José da Silva, and Maria Cristina FL Lara. "New electric double-layered magnetic fluids based on copper, nickel, and zinc ferrite nanostructures." *The Journal of Physical Chemistry B* 105, no. 6 (2001): 1168-1175.
[۹] Ţălu, Ştefan, Miroslaw Bramowicz, Slawomir Kulesza, Vali Dalouji, Shahram Solaymani, and Shahoo Valedbagi. "Fractal features of carbon–nickel composite thin films." *Microscopy Research and Technique* 79, no. 12 (2016): 1208-1213.
[۱۰] Naseri, Naimeh, Ştefan Ţălu, Slawomir Kulesza, Shervin Qarechalloo, Amine Achour, Miroslaw Bramowicz, Atefeh Ghaderi, and Shahram Solaymani. "How morphological surface parameters are correlated with electrocatalytic performance of cobalt-based nanostructures." *Journal of industrial and engineering chemistry* 57 (2018): 97-103.
[۱۱] Goudarzi, Samira, and Vali Dalouji. "The effect of Cu content in MWCNTs synthesized by Ni-Cu@ aC: H catalyst on the optical constants and the optical loss." *Optik* 223 (2020): 165585.
[۱۲] Dalouji, Vali. "Effect of deposition time on Polaron hopping conduction parameters in carbon films embedded by nickel nanoparticles." *Silicon* 10, no. 6 (2018): 2889-2894.
[۱۳] Hassanien, Ahmed Saeed, and Alaa A. Akl. "Effect of Se addition on optical and electrical properties of chalcogenide CdSSe thin films." *Superlattices and Microstructures* 89 (2016): 153-169.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

نانو پوشش مس برای محافظت در برابر خوردگی فولاد زنگ نزن ۳۰٤L

باقری، سپیده[۱]؛ زمانی میمیان، محمد رضا[۱]؛ غفاری نژاد، علی[۲]؛ خلیل زاده، شقایق[۱]؛ وطنی، راضیه[۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه علم و صنعت، نارمک، تهران

[۲]دانشکده شیمی دانشگاه علم و صنعت، نارمک، تهران

چکیده

در این پژوهش، نانو پوشش مس بر روی فولاد زنگ نزن ۳۰٤L به روش کندوپاش لایه نشانی شد. سپس ویژگی‌های ساختاری و شیمیایی لایه و ضخامت و مورفولوژی لایه توسط میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) مورد مطالعه قرار گرفت. به منظور بررسی تاثیر لایه ایجاد شده بر روی مقاومت خوردگی زیرلایه فولادی، تست‌های الکتروشیمیایی و طیف سنجی الکتروشیمیایی امپدانس (EIS) در محلول ۳/۵٪ سدیم کلرید انجام شد. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که جریان خوردگی از (μAcm^{-2}) ۱/۳۴×۱۰$^{-۶}$ به (μAcm^{-2}) ۳/۰۲×۱۰$^{-۷}$ کاهش پیدا کرده و مقاومت خوردگی از(kΩ) ۱۳/۰۲ به (kΩ) ۳۱/۶۹ افزایش یافته و در نتیجه این پوشش از فولاد زنگ‌نزن به خوبی محافظت کرده است.

Nano coating of copper for stainless steel 304L corrosion protection

Sepideh, Bagheri[1] ; Zamani Miamian, Mohammad Reza[1]; Ghaffarinejad, Ali[2]; Khalilzadeh, Shaghayegh[1]; Vatani, Razieh[1]

[1]*Department of Physics, Iran University of Science and Technology (IUST), Tehran*

[2]*Department of Chemistry, Iran University of Science and Technology (IUST), Tehran*

Abstract

In this research, nano coating of Copper (Cu) were deposited on stainless steel (304L) by the sputtering method. Then elemental analysis; Structural and chemical properties and cross section morphology were studied by scanning electron microscopy (SEM) methods. Corrosion inhibition efficiency was studied by the potentiodynamic polarization, electrochemical impedance spectroscopy (EIS) methods in 3.5% NaCl solution. The results showed that, the corrosion current is reduced from 1.34×10^{-6}(μA cm^{-2}) to 3.02×10^{-7}(μA cm^{-2}) and corrosion resistance increased from 13.02(kΩ) to 31.69(kΩ), as a result this coating has protective effect on stainless steel.

مقدمه:

فلزاتی مانند فولاد کربن ساده، آلومینیوم و آلیاژهای آن‌ها کاربردهای متعددی در بخش‌های دریایی، هوانوردی، صنعتی و تولیدی دارند. در حالی که این فلزات به دلیل خواص فیزیکی خود مانند سختی و نسبت بالای استحکام به وزن با ارزش هستند، در محیط‌های خورنده در برابر خوردگی بسیار آسیب پذیر هستند[1]. فولاد زنگ‌نزن، آلیاژی از فولاد می‌باشد که اصلی‌ترین عناصر تشکیل‌دهنده آن آهن، کروم و نیکل است[1]. فولاد زنگ‌نزن آستنیتی بزرگترین خانواده از فولاد زنگ‌نزن است. فولادهای سری ۳۰۰ یکی از زیرگروه‌های فولاد آستنیتی بوده و بزرگترین و پرکاربردترین فولادهای زنگ‌نزن مورد استفاده هستند. معروف‌ترین گرید آن فولاد زنگ نزن ۳۰۴ است که در آن ۱۸٪ کروم و ۸ یا ۱۰٪ نیکل استفاده می‌شود. گونه کم کربن این فولاد یعنی ۳۰٤L در حالت بیشینه تنها دارای ۰/۰۳٪ کربن است[2,3]. بنابراین دلیل اصلی استفاده از فولادهای زنگ‌نزن مقاومت بالای آن‌ها در برابر خوردگی است. خواصی مانند مقاومت در برابر خوردگی، استحکام بالا و ویژگی‌های مکانیکی مطلوب باعث کاربرد آن در بسیاری از زمینه های علمی و مهندسی از جمله صنایع شیمیایی و دارویی، صنایع پتروشیمی، خطوط نفت و گاز و سازه‌های دریایی شده است[1]. با این حال خوردگی ناحیه‌ای و در مواردی خوردگی یکنواخت در این نوع فولاد رخ می‌دهد[3,4]. روش‌های متفاوتی برای جلوگیری از خوردگی

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

شیمیایی فلزات وجود دارد. تشکیل یک لایه فلز روی سطح فولادهای زنگ‌نزن مقاومت آن‌ها را در برابر خوردگی بهبود می‌بخشد و به عنوان سد محافظ بین ماده و محیط قرار می‌گیرد[1,6]. این پوشش‌ها به شیوه‌های متفاوتی مانند: رسوب بخار شیمیایی، سل ژل، رسوب بخار فیزیکی (PVD) و غیره تهیه می‌شوند. با استفاده از فرآیند کندوپاش که یکی از روش‌های لایه نشانی فیزیکی تحت شرایط خلا است، می‌توان لایه‌های یکنواختی ایجاد کرد[7]. پوشش ایجاد شده از انتقال عوامل خورنده که به طور موثر با سطح مواد واکنش می‌دهند، جلوگیری می‌کنند. به عبارت دیگر پوشش‌های حفاظتی با ممانعت از نفوذ الکترولیت به سطح فلز، از واکنش بین مناطق کاتدی و آندی در فصل مشترک فلز و پوشش جلوگیری می‌کنند[7].

در این پژوهش، پوشش مس بر روی فولاد زنگ‌نزن به روش کندوپاش نشانده شد. فلز مس به دلیل تشکیل فیلم‌های به هم چسبیده روی سطح مواد دارای مقاومت به خوردگی در برابر آب و بخار، محلول های نمکی، خاک‌ها، کانی‌های غیراکسیدی و اسیدهای آلی است. این فلز معمولا در کاربردهای الکتریکی، سطحی و ساختاری استفاده می‌شود. طبق نتایج حاصل از مقالات تحقیقاتی میزان خوردگی پوشش تک لایه مس با افزایش چگالی جریان رسوب افزایش می‌یابد[8] و حفاظت از خوردگی شیمیایی این پوشش در محلول سدیم کلرید ۳/۵٪ توسط میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM)، مقاومت پلاریزاسیون و طیف سنجی الکتروشیمیایی امپدانس (EIS) مورد مطالعه قرار گرفت.

روش آزمایش

- **مواد و روش‌ها**

نمونه فولاد زنگنزن ۳۰٤L به صورت قطعات ۱×۲ سانتی‌متری برش داده شد. ابتدا قطعات جهت یک دست سازی سطح با استفاده از کاغذهای سمباده با زبری‌های متفاوت ۸۰۰، ۱۰۰۰، ۱۲۰۰ و ۲۰۰۰ صیقل داده شده و سپس به همراه شیشه های ۱×۲ قبل از لایه نشانی در حمام آلتراسونیک توسط آب دیونیزه، متانول و استون به مدت ده دقیقه به ترتیب شسته شدند.

لایه نازک مس بر روی فولاد زنگنزن و نمونه شیشه به روش کندوپاش توسط دستگاه کندوپاش مدل DST3-A (شرکت پوشش‌های نانو ساختار ایران) لایه نشانی شد. هدف مس (۹۹/۹۹٪) به منبع DC متصل شد. لایه نشانی در دمای اتاق و به مدت ۶۰۰ ثانیه انجام گرفت.

فشار پایه	5.4×10^{-2} Torr
فشار کاری	3.2×10^{-4} Torr
توان DC	15W
جریان آرگون	35scum

جدول ۱: پارامترهای به کار رفته در فرآیند لایه نشانی مس

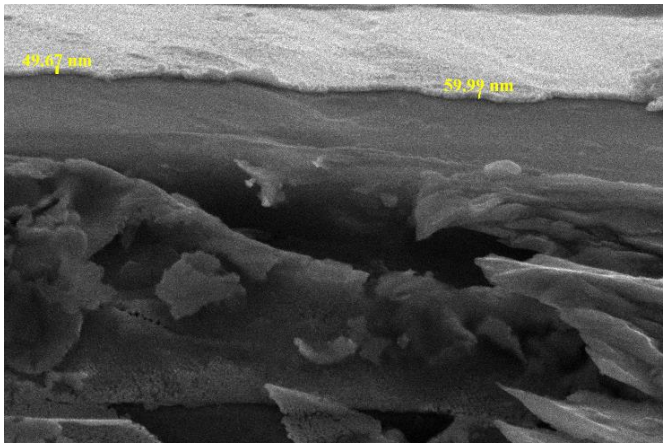
در جدول ۱ پارامترهای به کار رفته در لایه نشانی گزارش شده است. پس از لایه نشانی، ویژگی‌های ساختاری و شیمیایی زیرلایه و مورفولوژی سطح و ضخامت نمونه توسط میکروسکوپ الکترونی روبشی (Republic Czech, VEGA3-TESCAN) تصویربرداری شد. تست‌های خوردگی شیمیایی با استفاده از دستگاه اتولب کنترل شده با نرم افزار Nova۱/۱۱ (مدل AUT71083 از شرکت Met Rohm) انجام گرفت که مجهز به سامانه سه الکترودی شامل الکترود نقره/نقره کلرید (AgAg/Cl) پر شده با محلول ۳M از KCl به عنوان الکترود مرجع، الکترود پلاتین به عنوان الکترود کمکی و فولاد ۳۰۴L به عنوان الکترود کار می‌باشد. کلیه آنالیزهای خوردگی شیمیایی در محلول سدیم کلرید ۳/۵٪ به عنوان محیط خورنده انجام شد.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بحث و نتیجه

تحلیل ویژگی‌های ساختاری و شیمیایی

ضخامت لایه نازک مس توسط میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) اندازه گیری شد.



شکل ۳: تصویر SEM (Cross) پوشش مس

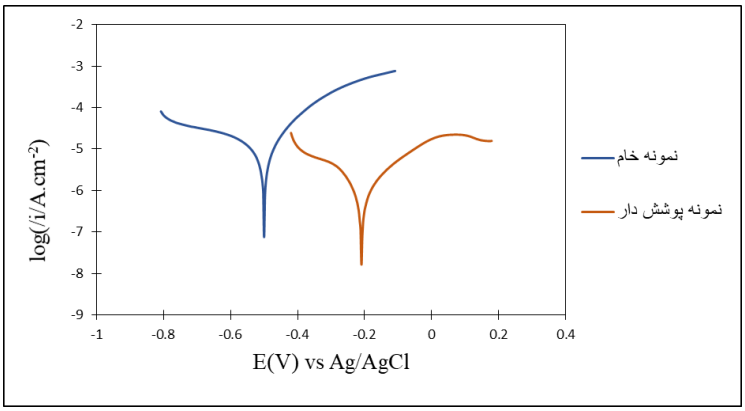
شکل ۳ تصویر لایه نازک نشانده شده روی شیشه را نشان می‌دهد. با توجه به شکل ۳ ضخامت لایه کمتر از ۱۰۰ نانومتر بوده و در رده پوشش‌های نانوساختار قرار می‌گیرد.

اندازه گیری پلاریزاسیون خوردگی شیمیایی

به منظور اندازه گیری پارامترهای دینامیکی و جنبشی، منحنی‌های پلاریزاسیون پتانسیل دینامیکی فولاد زنگ‌نزن در محلول سدیم کلرید ۳/۵٪ در نمودار ۱ رسم شده است و پارامترهای الکتروشیمیایی پتانسیل خوردگی (E_{corr})، دانسیته جریان خوردگی (I_{corr})، شیب‌های تافلی ناحیه آندی (b_a) و ناحیه کاتدی (b_c)، مقاومت پلاریزاسیون که از ناحیه آندی و کاتدی منحنی تافل استخراج شده و درصد بازدارنگی که از رابطه ۱ به دست آمده، در جدول ۲ گزارش شده است.

$$IE\ \% = \frac{Icorr - I'corr}{Icorr} \times 100 \qquad (۱)$$

که در این رابطه I_{corr} جریان خوردگی نمونه خام است.



نمودار (۱): نمودار جریان خوردگی بر حسب پتانسیل خوردگی

در نمودار ۱ مشاهده می‌شود که جریان خوردگی نمونه پوشش داده شده پایین‌تر از جریان خوردگی نمونه خام قرار گرفته است.

نمونه	E_{ctor} (mV)	I_{scor} ($\mu A\ cm^{-2}$)	b_e ($mV\ dec^{-1}$)	b_e ($mV\ dec^{-1}$)	IE (%)	مقاومت پلاریزاسیون (kΩ)
خام	-0.51	1.34×10^{-6}	0.15	0.14	-	23.24
با پوشش	-0.21	3.02×10^{-7}	0.05	0.05	95.56	36.3

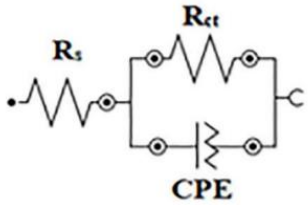
جدول ۲: نتایج حاصل از برون یابی تافل

نتایج حاصل از جدول ۲ نشان می‌دهد که مقاومت پلاریزاسیون و درصد بازدارندگی نمونه پوشش دار نسبت به نمونه خام افزایش یافته و جریان خوردگی و پتانسیل خوردگی آن نیز کاهش داشته است. در نتیجه نمونه پوشش داده شده از کیفیت و مقاومت خوبی برخوردار است.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تحلیل امپدانس الکتروشیمیایی

جهت بدست آوردن مقاومت خوردگی، شیب منحنی حاصل از امپدانس الکترو شیمیایی را مورد مطالعه قرار می‌گیرد. شکل ۱ مدار معادل داده‌های حاصل از امپدانس را نشان می‌دهد.



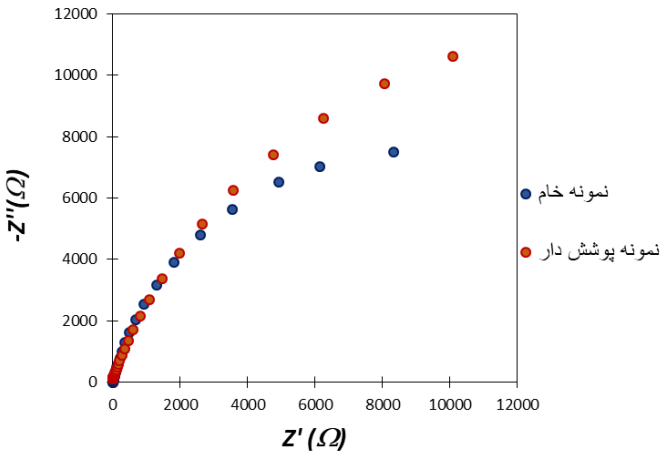
شکل ۱: مدار معادل داده‌های امپدانس الکتروشیمیایی

از مدار معادل شکل ۳ برای یافتن بهترین برازش منحنی نایکوست استفاده شد. در حقیقت این مدار معادل، همان مدار معادل رندلس است که به جای خازن در آن از المان فاز ثابت استفاده شده است. از مدار معادل رندلس زمانی استفاده می‌شود که منحنی نایکوست بایک ثابت زمانی به شکل نیم دایره کامل بوده و از حالت ایده‌آل انحرافی نداشته باشد. اما هنگامی که یک رفتار خازنی را نتوان به طور مناسبی با یک خازن نشان داد به جای خازن از یک المان فاز ثابت استفاده می‌شود. این وضعیت گاهی اوقات در مدل سازی فرایندهای خوردگی گوناگون در هنگام اندازه‌گیری امپدانس پیش می‌آید. در این وضعیت خازن اندازه‌گیری شده از رفتار یک خازن خالص انحراف نشان می‌دهد که برای حل این مشکل از المان فاز ثابت به جاب خازن استفاده می‌شود.[10]

مقاومت محلول بین الکترود مرجع و الکترود کار (R_S) و مقاومت انتقال شار خوردگی (R_p) با استفاده از این آنالیز به دست می‌آید. همچنین درصد بازدارندگی (IE%) با رابطه ۲ محاسبه می‌شود:

$$IE\% = \frac{Rp - R\prime p}{Rp} \times 100 \qquad (۲)$$

که در این رابطه R_p مقاومت نمونه خام است.



نمودار (۲): مقایسه منحنی‌های NY Quist

در نمودار ۲ مشاهده می‌شود که شیب منحنی نمونه پوشش داده شده از نمونه خام بیشتر است که متناسب با آن مقاومت خوردگی نیز افزایش می‌یابد.

نمونه	CPE.Y0 (off)	R_{at} (kΩ)	R_{est} (kΩ)	CPE.N	IE (%)
خام	1.51×10^{-5}	13.02	21.18	0.99462	-
با پوشش	5.02×10^{-5}	31.69	34.22	0.99336	58.91

جدول ۳: نتایج حاصل از آنالیز امپدانس

با توجه به نتایج حاصل از جدول ۳ درصد بازدارندگی و مقاومت خوردگی نمونه پوشش داده شده نسبت به نمونه بدون پوشش افزایش یافته است. نتایج نشان می‌دهد که نمونه پوشش دار نسبت به نمونه بدون پوشش از مقاومت بیشتری برخوردار است.

نتیجه گیری

نانوپوشش مس به منظور حفاظت از فولاد زنگنزن ۳۰٤L معرفی شده است. این پوشش توسط فرآیند لایه نشانی به روش کندوپاش تولید شد. مطالعات نشان داد پوشش ارائه شده جریان خوردگی را کاهش و مقاومت فولاد زنگ‌نزن را در برابر خوردگی شیمیایی افزایش داده

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

است. به عبارت دیگر پوشش ارائه شده کیفیت و مقاومت فولاد زنگ‌نزن ۳۰٤L را افزایش می‌دهد.

منابع

[1] Modiri, F., & Savaloni, H. Anti-corrosion properties of stainless steel 304L coated with Mn-based thin film and annealed with nitrogen flux exposed to saline solution under various temperatures. Journal of Theoretical and Applied Physics. (2020). 14(3), 223-236. https://doi.org/10.1007/s40094-020-00381-6

[2] Davis, J. R. (Ed.). *Stainless steels*. ASM international. (1994).

[3] Reynolds, A. P., Tang, W., Gnaupel-Herold, T., & Prask, H. Structure, properties, and residual stress of 304L stainless steel friction stir welds. Scripta materialia. (2003). 48(9), 1289-1294. https://doi.org/10.1016/S1359-6462(03)00024-1

[4] Kain, R. M., Tuthill, A. H., & Hoxie, E. C. The resistance of types 304 and 316 stainless steels to crevice corrosion in natural waters. Journal of Materials for Energy Systems.(1984). 5(4), 205-211. https://doi.org/10.1007/BF02835718

[5] William, F. Smith, Structure and properties of engineering materials. (1987).

[6] Montemor, M. D. F. Functional and smart coatings for corrosion protection: A review of recent advances. Surface and Coatings Technology. (2014). 258, 17-37. https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2014.06.031

[7] Rossi, C. Engineering of Al/CuO reactive multilayer thin films for tunable initiation and actuation. Propellants, Explosives, Pyrotechnics. (2019). 44(1), 94-108. https://doi.org/10.1002/prep.201800045

[8] Banthia, S., Sengupta, S., Das, S., & Das, K. Cu, Cu-SiC functionally graded coating for protection against corrosion and wear. Surface and Coatings Technology, (2019). 374, 833-844. https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2019.06.050

[9] Bardal, E. Corrosion and Protection Engineering Materials and Processes, Springer Science & Business Media, 2007

[10] فتاح الحسینی، آرش. منیعی، مهرداد. «بررسی تاثیر زبری سطح بر مقاومت به خوردگی فولاد زنگ نزن ۳۱٦ کم کربن در آب دریای ساختگی »، پانزدهمین سمینار ملی مهندسی سطح، پژوهشگاه مواد و انرژی ۲۹ و ۳۰ مرداد ۱۳۹۳

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مطالعه ویژگی‌های ساختاری و مغناطیسی نانوذرات فریت اسپینل آلایش یافته با ساماریوم

نیک‌منش، حسین[۱]؛ جابرالانصار، الناز[۲]

[۱]دانشکده علوم و فناوری نانو و زیستی، دانشگاه خلیج فارس، بوشهر ۷۵۱۶۹، ایران
[۲]دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان ۸۴۱۵۶-۸۳۱۱۱، ایران

چکیده

در این مطالعه از روش سل‌ژل خود احتراقی جهت ساخت نانوذرات فریت یافته با ساماریوم با فرمول شیمیایی $CoFe_{2-x}Sm_xO_4$ $(x=0, 0.02, 0.04, 0.06)$ استفاده شده است. به منظور بررسی خواص ساختاری از XRD، FTIR، FESEM، و HRTEM و برای بررسی خواص مغناطیسی از آنالیز نمونه مرتعش (VSM) استفاده شده است. آنالیز ساختاری تایید کننده تشکیل ساختار اسپینل با گروه فضایی fd3m می‌باشد و داده های XRD توسط برنامه MAUD تجزیه و تحلیل شد جایگزینی موفقیت آمیز کاتیون آن توسط کاتیون های ساماریوم در سلول واحد شبکه فریت کبالت را تایید کرد. آنالیز FESEM نشان‌دهنده شکل کروی نانوذرات با ابعادی نزدیک به ابعاد استخراج شده از آنالیز XRD است. هم چنین الگوی به دست آمده از آنالیز FTIR نیز وجود مدهای نوسانی مربوط به هر یک از زیرشبکه‌های شبکه اسپینلی را تایید.

Study of the structural and morphological properties of Sm doped Cobalt ferrite nanoparticles

Nikmanesh, Hossein[1]; Jaberolansar, Elnaz[2]

[1]Department of Physics, Persian Gulf University, Bushehr 75169, Iran
[2]Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan 84156-83111, Iran

Abstract

In this study, sol-gel auto-combustion method was used for preparing the samarium- cobalt ferrite with chemical formula $CoFe_{2-x}Sm_xO_4$ $(x=0, 0.02, 0.04, 0.06)$ ferrite nanoparticles XRD FTIR, FESEM, and HRTEM were used to investigate the structural properties and vibration sample analysis (VSM) was used to investigate the magnetic properties. Structural analysis confirmed the formation of spinel structure with fd3m spatial group and XRD data were analyzed by MAUD program. Successful replacement of its cation by samarium cations in a single cell of cobalt ferrite lattice confirmed. FESEM analysis indicates Spherical shape of nanoparticles with dimensions close to the dimensions extracted from XRD analysis. FTIR spectrum confirmed the presence of two prominent stretching vibrations related to metal complexes in the ferrite sublattices.

PACS No. 75

مقدمه

امروزه، مطالعات نانوذرات اکسیدهای مغناطیسی به دلیل مزایای تکنولوژیکی امیدوارکننده برای کاربرد در پزشکی، ضبط مغناطیسی، کاتالیزورها توجه زیادی را به خود جلب کرده است [۱-۴]. در میان طیف گسترده‌ای از نانوذرات فریت، فریت کبالت به عنوان یک ماده مغناطیسی سخت که اجباری بالایی از خود نشان می‌دهد، توجه

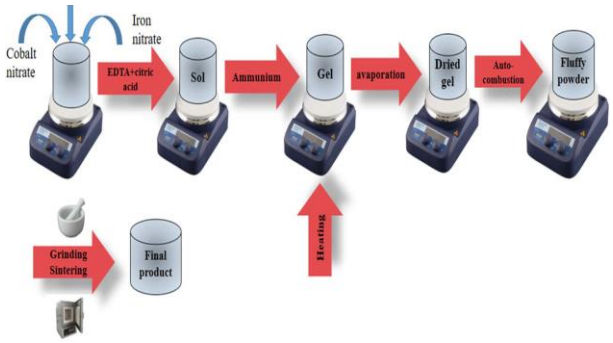
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

زیادی را به خود جلب کرده است. همچنین یک مغناطش اشباع افزایش یافته، حدود 80 emu/g در دمای اتاق، و ناهمسانگردی مغناطیسی بلوری قابل توجهی را نشان می دهد. $CoFe_2O_4$ یک ساختار اسپینل مخلوط دارد، که در آن یون‌های Fe^{+3} و Co^{+2} به‌طور تصادفی در مکان‌های چهار وجهی A و مکان‌های هشت‌وجهی B توزیع می‌شوند، اگرچه یون‌های کبالت ترجیح می‌دهند که مکان‌های هشت‌وجهی B را اشغال کنند.

کار حاضر به نانوذرات فریت اسپینل $CoFe_2O_4$ آلایش شده توسط یون های ساماریوم می پردازد. ساماریوم یک افزودنی موثر است که می تواند شکل توزیع کاتیون ها را در سایت های اسپینل چهار وجهی و هشت وجهی تغییر دهد. انتظار می رود پیکربندی الکترونی ساماریوم اساساً خواص ساختاری و مغناطیسی شبکه اسپینل را تغییر دهد. از این رو در این پژوهش، با انجام آنالیزهای مختلف، ویژگی‌های ساختاری و مغناطیسی نانوذرات فریت کبالت آلاییده شده با ساماریوم مورد بررسی قرار گرفته است.

روش ساخت:

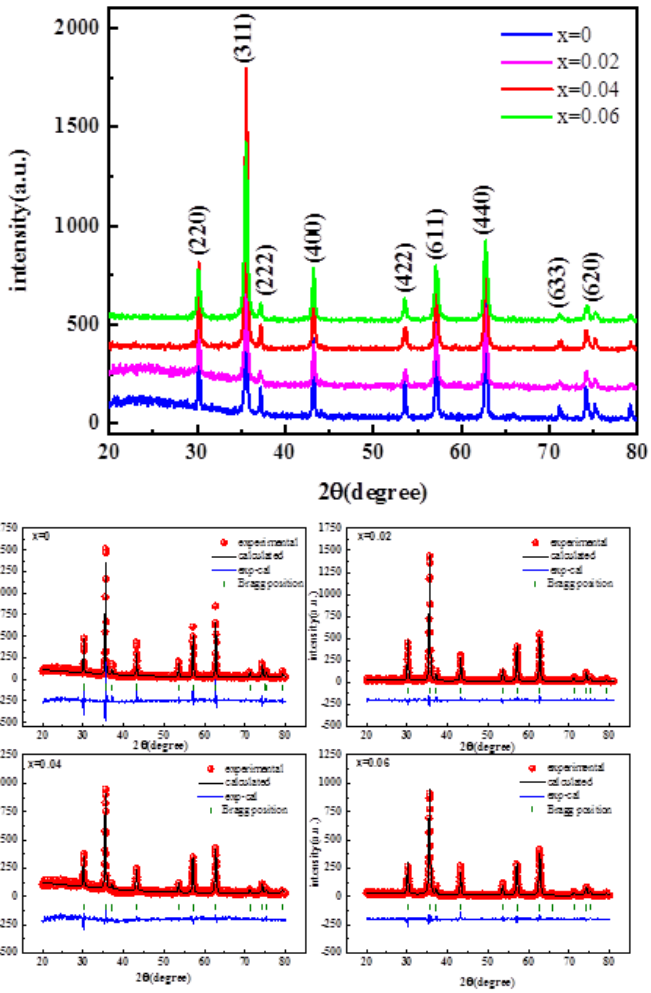
در این مطالعه نانوذرات فریت $CoFe_{2-x}Sm_xO_4$ به روش سل-ژل خوداحتراقی ساخته شدند. فرآیند طی شده در این روش جهت ساخت نمونه‌ها به صورت طرحی در شکل ۱ قابل مشاهده است که میزان مصرفی هر ماده به نسبت استوکیومتری 0.125 mol است.



شکل ۱ : طرحی از فرآیند طی شده در روش سل‌ژل خوداحتراقی برای ساخت نانوذرات فریت کبالت پاراسئودیمیوم

نتایج و بحث:

پس از آماده‌سازی نمونه‌ها به روش سل‌ژل خوداحتراقی، آنالیز XRD به‌منظور اطمینان از تشکیل فاز اسپینل انجام شد. طیف XRD نمونه‌ها در شکل ۲ قابل مشاهده است. داده‌های حاصل از این آنالیز تاییدکننده شکل‌گیری فاز یگانه اسپینلی برای همه نمونه‌ها هست. در این مطالعه از آنالیز ریتولد انجام شده توسط نرم‌افزار MAUD جهت بررسی ویژگی‌های ساختاری و به‌دست آوردن الگوی توزیع کاتیون استفاده کردیم. پارامترهای ساختاری و مقادیر پارامتر شبکه (a) محاسبه شده توسط این نرم‌افزار در جدول آمده است.

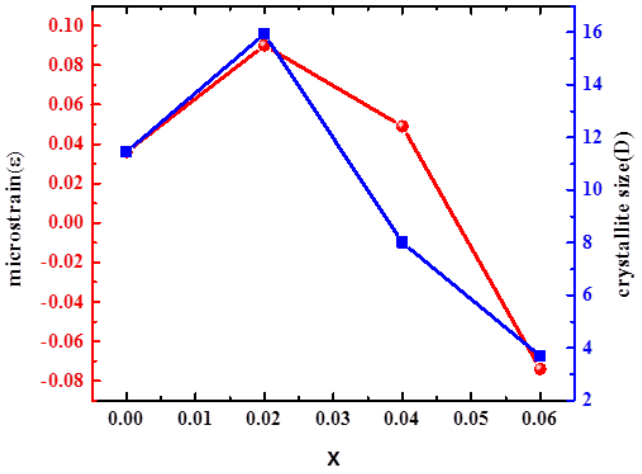


شکل 2 – طیف XRD نمونه‌ها بر حسب میزان آلایش

جدول ۱. ثابت های شبکه و پارامترهای ساختاری برای آلاییدگی های مختلف

Sm content, x (at.%)	*sig*	R_w(%)	R_{wnb}(%	R_b(%)	R_{exp}(%)	*a*(Å)	D_x(g·cm^{-3})	D(nm)	D_g(nm)	ε
0.00	1.86	22.84	27.26	18.49	12.23	8.388	5.281	11.5	23	0.0
0.02	1.53	18.09	18.17	14.21	11.76	8.386	5.327	15.9	45	0.0
0.04	1.29	20.67	20.45	15.87	15.98	8.384	5.374	8.0	18	0.0
0.06	1.14	18.84	19.65	13.18	16.42	8.381	5.422	3.7	10	-.0

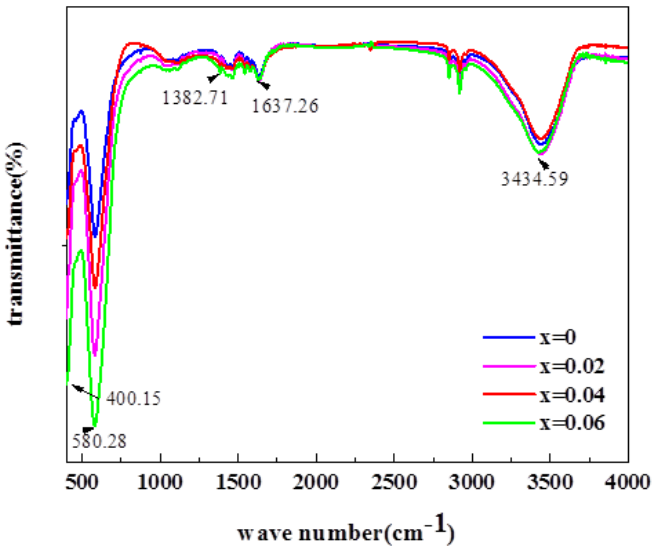
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



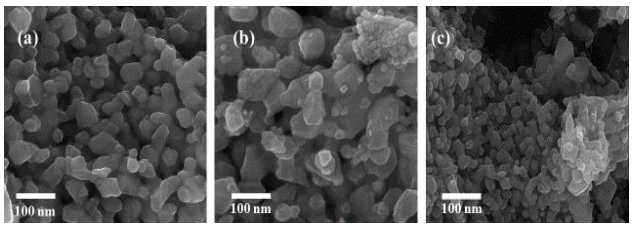
شکل ۳. تغییرات تنش و مقادیر اندازه کریستالیت برحسب آلایش

مقادیر محاسبه شده اندازه کریستالیت در جدول ۱ و شکل ۳ نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می شود، این پارامتر از روند یکسانی پیروی می کند. اندازه CoFe2O4 خالص حدود ۱۱/۵ نانومتر است که در x = 0.02 تا ۱۵/۹ نانومتر افزایش می یابد و سپس در نتیجه آلایش ساماریوم بیشتر به ۳/۷ نانومتر کاهش می یابد. در واقع می توان نتیجه گرفت که آلایش ساماریوم رشد فریت کبالت را محدود می کند. اندازه کریستال به طور معمول توسط انرژی کلی کریستال که به مساحت سطح مربوط می شود، کنترل می شود. در ادامه، به منظور بررسی بیشتر ویژگی‌های ساختاری نمونه‌ها آنالیز FTIR انجام شد که تصویر مربوط به این آنالیز در شکل 4موجود است. داده‌های به دست آمده از این آنالیز تایید کننده تشکیل ساختار اسپینل هستند، ضمن اینکه پیک اضافی مبنی بر وجود ناخالصی در طیف FTIR مشاهده نمی‌شود.

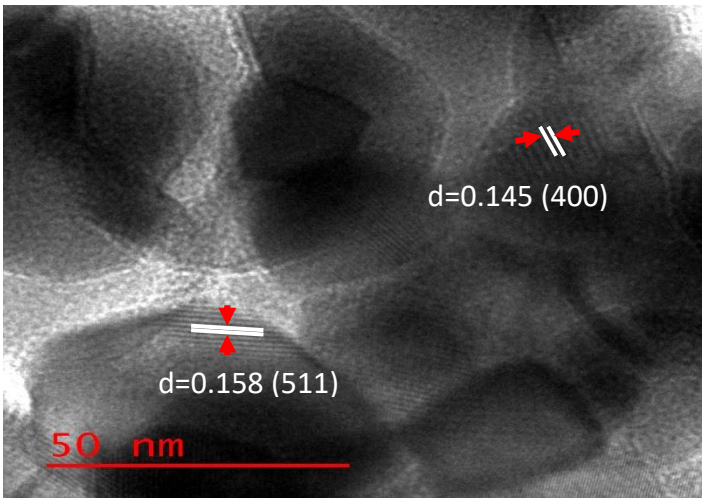
تصاویر مربوط به آنالیزهای FESEM و HRTEM مربوط به نمونه فریت خالص به ترتیب در شکل‌های ۵ و ٦ نشان داده شده‌اند. شکل‌گیری ذرات کروی شکل با ابعادی در حدود ۳۰-٤۰ nm به خوبی در این تصاویر قابل مشاهده است. آنالیز HRTEM با وضوح بالا جهت مشاهده صفحات بلوری و همچنین امکان محاسبه فاصله بین این صفحات انجام شد. شکل٦ به خوبی نشان‌دهنده تشکیل صفحات بلوری است که تایید کننده بلورشدگی مناسب در ساختار نانوذرات است. فاصله بین صفحات براگ (d) نیز محاسبه شد که مقادیر به دست آمده به میزان 0.145 نشان‌دهنده صفحات (400) و مقدار 0.158 نشان‌دهنده صفحات (511) می‌باشند.



شکل ٤- طیف FTIR نمونه‌ها بر حسب میزان آلایش



شکل ۵- تصویر FESEM

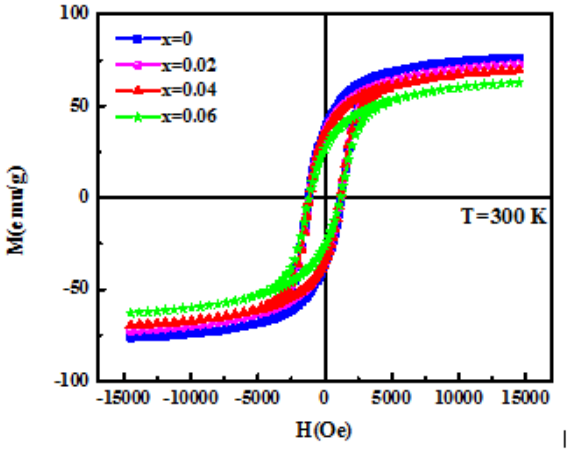


شکل 7- تصویر HRTEM مربوط به نمونه $CoFe_2O_4$

به منظور بررسی رفتار مغناطیسی نمونه‌ها در دمای ۳۰۰ کلوین آنالیز اسکویید انجام شد. حلقه های پسماند مغناطیسی برای تمام نمونه های نانوبلور اندازه گیری شده در دما ۳۰۰ کلوین در شکل ۸ نشان

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

داده شده است. مقادیر مغناطیسی اشباع، Ms، و میدان اجباری، Hc، استخراج شده از نمودارهای شکل ۸، در جدول ۲ فهرست شده است. جدول ۲ نشان می دهد که مقدار MS کاهش چشمگیری از ۷۶ emu/g برای فریت کبالت خالص به ۸۶ emu/g برای x = 0.06 در ۳۰۰ K را تجربه می کند. با این حال مقدار HC کاهش کمی را از ۱۲۴۰ Oe برای x = 0 به ۱۵۰ Oe برای x = 0.04 نشان می دهد. به دلیل ماهیت پارامغناطیسی کاتیون ساماریوم، گشتاور مغناطیسی زیرشبکه (B) کاهش می‌یابد که منجر به کاهش مغناطش خالص نانوذرات فریت در ۳۰۰ کلوین می‌شود. با این حال، ممکن است از طریق آن، جایگزینی یون‌های آهن با یون‌های Sm3+ باعث شود که برخی از یون‌های آهن چهار وجهی به سمت مکان‌های هشت‌وجهی B حرکت کنند. اگرچه انتظار می رود این شکل از توزیع کاتیون باعث افزایش مگابایت و در نتیجه مغناطش خالص شود، ماهیت پارامغناطیسی Sm3+ در ۳۰۰ کلوین به طور عمده مغناطش در جایگاه هشت وجهی را کاهش می دهد. نکته قابل توجه دیگر به برهم کنش تبادلی بین سایت های A و B اشاره دارد. برهمکنش منفی A-B به عنوان یک عامل مهم در رفتار مغناطیسی فریت های اسپینل به حساب می آید.



شکل ۷- منحنی پسماند نمونه ها در دما 300K

جدول۲ – پارامترهای مغناطیسی برای آلاییدگی های مختلف

Sm content, x (at.%)	Ms(emu/g)	Hc(Oe)	$R = \frac{M_r}{M_S}$	K(10^4 erg/cm^3)
00.0	76.2	1240	0.47	75
0.02	72.7	1170	0.49	104
0.04	70.0	1150	0.50	84
0.06	62.8	1180	0.42	103

نتیجه‌گیری

در این پروژه نانوذرات فریت کبالت آلاییده شده با کاتیون‌های Sm^{3+} به روش سل‌ژل خوداحتراقی ساخته شدند. آنالیزهای متفاوت ساختاری به منظور اطمینان از شکل‌گیری ساختار اسپینل اتجام شد. نتایج تحلیل‌های XRD و FTIR تایید کننده تشکیل ساختار فریت می‌باشد. پارامترهایساختاری نیز با بهره‌گیری از داده‌های به دست آمده از آنالیز XRD محاسبه شدند. آنالیزهای متفاوتی جهت بررسی مورفولوژی نانوذرات تهیه شده انجام شدند که وجود ذرات کروی شکل با ابعادی نزدیک به داده‌های XRD تایید شد. شکل گیری صفحات بلوری با بلورشدگی مناسب و مدهای نوسانی نیز توسط تصاویر HRTEM و FTIR به تایید رسید.

مرجع‌ها

[1] C. Srinivas, E. R. Kumar, B. Tirupanyam, S. S. Meena, P. Bhatt, C. Prajapat, et al., "Study of magnetic behavior in co-precipitated Ni–Zn ferrite nanoparticles and their potential use for gas sensor applications," Journal of Magnetism and Magnetic Materials, vol. 502, p. 166534, 2020.
[2] H. Nikmanesh, E. Jaberolansar, P. Kameli, and A. G. Varzaneh, "Effect of praseodymium in cation distribution, and temperature-dependent magnetic response of cobalt spinel ferrite nanoparticles," Nanotechnology, 2022
[3] S. Ahmadian-Fard-Fini, D. Ghanbari, and M. Salavati-Niasari, "Photoluminescence carbon dot as a sensor for detecting of Pseudomonas aeruginosa bacteria: Hydrothermal synthesis of magnetic hollow NiFe2O4-carbon dots nanocomposite material," Composites Part B: Engineering, vol. 161, pp. 564-577, 2019.
[4] J. Parhizkar and M. H. Habibi, "Synthesis, characterization of cobalt ferrite nanoparticles and application in drug delivery: Flufenamic acid."

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مطالعه ویژگی‌های ساختاری و مورفولوژی نانوذرات فریت کبالت آلایش یافته با پاراسئودیمیوم (Pr)

نیک‌منش، حسین[۱]؛ جابرالانصار، الناز[۲]

[۱]دانشکده علوم و فناوری نانو و زیستی، دانشگاه خلیج فارس، بوشهر ۷۵۱۶۹، ایران
[۲]دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان ۸۴۱۵۶-۸۳۱۱۱، ایران

چکیده

در این پروژه از روش سل‌ژل خود احتراقی جهت ساخت نانوذرات فریت کبالت-پاراسئودیمیوم $CoFe_{2-x}Pr_xO_4$ $(x=0, 0.02, 0.04, 0.06)$ استفاده شده است. آنالیز XRD تایید کننده تشکیل ساختار اسپینل با گروه فضایی fd3m می‌باشد اندازه زوایا و فواصل بین یون‌ها در زیرشبکه‌های ساختار اسپینل نیز محاسبه شده است. آنالیز FESEM نشان‌دهنده شکل کروی نانوذرات با ابعادی نزدیک به ابعاد استخراج شده از آنالیز XRD است. آنالیزهای TEM، HRTEM و SAED نیز به‌منظور بررسی دقیق‌تر ویژگی‌های ساختاری و ریخت شناسی نانوذرات تهیه شده انجام شد که داده‌های هر یک از آن‌ها تاییدکننده اطلاعات به دست آمده از XRD و FESEM است . الگوی به دست آمده از آنالیز FTIR نیز وجود مدهای نوسانی مربوط به هر یک از زیرشبکه‌های شبکه اسپینلی را تایید نمود.

Study of the structural and morphological properties of Pr doped Co ferrite nanoparticles

Nikmanesh, Hossein[1]; Jaberolansar, Elnaz[2]

[1]Department of Physics, Persian Gulf University, Bushehr 75169, Iran
[2]Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan 84156-83111, Iran

Abstract

In this work, sol-gel auto-combustion method was used for preparing the $CoFe_{2-x}Pr_xO_4$ $(x=0, 0.02, 0.04, 0.06)$ ferrite nanoparticles. XRD analysis confirmed the formation of spinel structure with fd3m space group. We also calculated the interionic angles and distances in the spinel structure. FESEM analysis revealed the spherical-shaped particles with dimensions close to the data extracted from XRD analysis. TEM, HRTEM and SAED analyses were also performed to study the structural and morphological properties of the prepared nanoparticles in detail. The data extracted from HRTEM and SAED confirmed the information of XRD and FESEM patterns. FTIR spectrum confirmed the presence of two prominent stretching vibrations related to metal complexes in the ferrite sub-lattices.

PACS No. 75

مقدمه

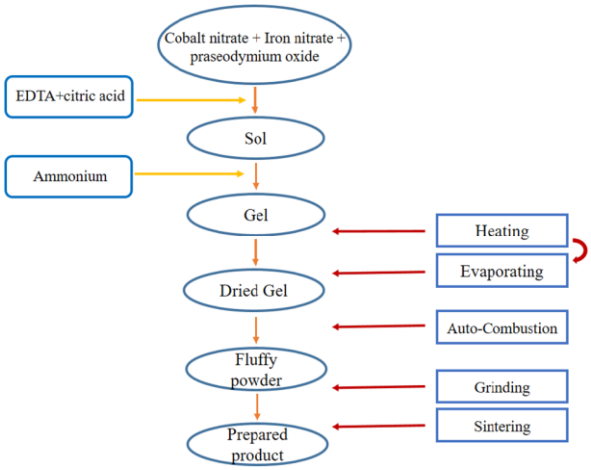
در سال‌های اخیر مطالعه بر روی نانوذرات مغناطیسی مورد توجه بسیاری از محققان در سرتاسر جهان قرار گرفته است. علت عمده تمرکز سامانه‌های مطالعاتی بر نانوذرات مغناطیسی به‌خصوص دسته‌ای از مواد با نظم فری‌مغناطیس کاربردهای قابل توجه این نانوذرات در عرصه‌های مختلف علمی است. از جمله این کاربردها می‌توان به استفاده از این نانوذرات در عرصه پزشکی به عنوان حامل داروها در بدن انسان اشاره کرد. تشخیص و درمان برخی از

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

سرطان‌ها نیز زمینه دیگری از علم پزشکی است که نانوذرات فریت‌های مغناطیسی نقش قابل توجهی در آن ایفا می‌کنند. ذخیره-سازی اطلاعات با حجم بالا، آهنرباهای دائمی، حسگرها و تصفیه آب از جمله نواحی دیگر علمی هستند که نانوذرات فریت‌های مغناطیسی گزینه‌های مناسبی جهت توسعه این صنایع محسوب می‌شوند[1] . از این رو در این پژوهش، با انجام آنالیزهای مختلف، ویژگی‌های ساختاری و سطحی نانوذرات فریت کبالت آلاییده شده با پاراسئودیمیوم مورد بررسی قرار گرفته است.

روش ساخت:

در این مطالعه نانوذرات فریت $CoFe_{2-x}\,Pr_x\,O_4$ به روش سل‌ژل خوداحتراقی ساخته شدند. فرآیند طی شده در این روش جهت ساخت نمونه‌ها به صورت طرحی در شکل ۱ قابل مشاهده است.



شکل۱ : طرحی از فرآیند طی شده در روش سل‌ژل خوداحتراقی برای ساخت نانوذرات فریت کبالت پاراسئودیمیوم

نتایج و بحث:

پس از آماده‌سازی نمونه‌ها به روش سل‌ژل خوداحتراقی، آنالیز XRD به‌منظور اطمینان از تشکیل فاز اسپینل انجام شد. طیف XRD نمونه‌ها در شکل ۲ قابل مشاهده است. داده‌های حاصل از این آنالیز تاییدکننده شکل‌گیری فاز یگانه اسپینلی برای نمونه‌های با $x \le 0.04$ است. نمونه با مقدار آلایش $x = 0.06$ دارای فاز ثانویه $PrFeO_3$ است که علت تشکیل این فاز ثانویه عمدتا به اختلاف شعاع یونی یون‌های Pr^{3+} و Fe^{3+} نسبت داده می‌شود[2] .

در ادامه به محاسبه فواصل و زوایای بین یون‌ها در زیرشبکه‌های چهار و هشت وجهی از روابط زیر پرداخته شده است. طرحی شامل این زوایا وفواصل در شکل ۳ آورده شده است. مقادیر به دست آمده نیز در جدول ۱ قابل مشاهده است.

$$P = a\sqrt{3}\left(u-\frac{1}{4}\right)\text{Å} \text{ و } q = a\sqrt{3}\left(u-\frac{1}{4}\right)\text{Å}$$

$$r = a\sqrt{11}\left(u-\frac{1}{4}\right)\text{Å} \text{ و } s = a\sqrt{3}\left(\frac{u}{3}+\frac{1}{8}\right)\text{Å}$$

$$b = \sqrt{2}\left(\frac{a}{4}\right)\text{Å} \text{ و } c = \sqrt{11}\left(\frac{a}{8}\right)\text{Å} \text{ و } d = \sqrt{3}\left(\frac{a}{4}\right)\text{Å}$$

$$e = \sqrt{3}\left(\frac{3a}{8}\right)\text{Å} \text{ و } f = \sqrt{6}\left(\frac{a}{4}\right)\text{Å}$$

$$\theta_1 = \cos^{-1}\left(\frac{p^2+q^2-c^2}{2pq}\right)$$

$$\theta_2 = \cos^{-1}\left(\frac{p^2+r^2-e^2}{2pr}\right)$$

$$\theta_3 = \cos^{-1}\left(\frac{2p^2-b^2}{2p^2}\right)$$

$$\theta_4 = \cos^{-1}\left(\frac{p^2+s^2-f^2}{2ps}\right)$$

$$\theta_5 = \cos^{-1}\left(\frac{r^2+q^2-d^2}{2qr}\right)$$

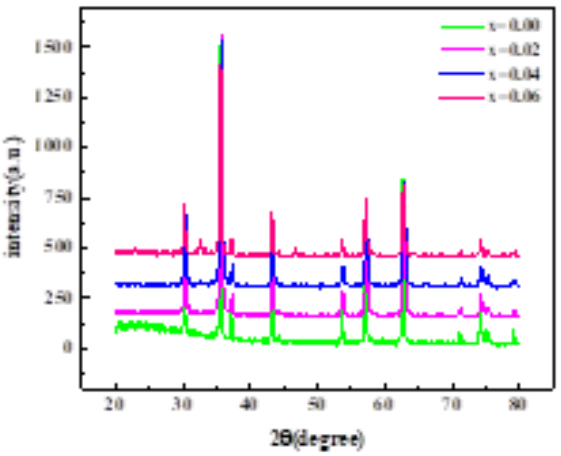
جدول۱ : مقادیر زوایای بین اتمی($\theta_1,\theta_2,\theta_3,\theta_4,\theta_5$) بر حسب درجه و فواصل بین اتمی (p, q, r,s,b,c,d,e,f) بر حسب آنگستروم

x	p	q	r	s	b	c	d
0	2.097	1.572	3.477	3.632	2.965	3.477	3.632
0.02	2.0975	1.573	3.478	3.632	2.966	3.478	3.632
0.04	2.0962	1.572	3.476	3.630	2.964	3.476	3.630
0.06	2.095	1.571	3.475	3.629	2.963	3.475	3.629

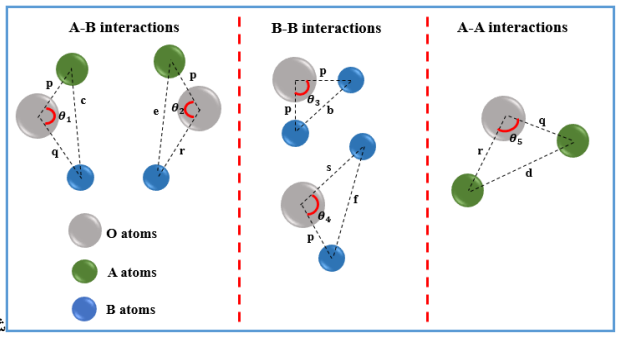
e	f	θ_1	θ_2	θ_3	θ_4	θ_5
5.447	5.136	142.35	154.78	89.97	125.23	82.8
5.449	5.137	142.36	154.78	89.98	125.28	82.76
5.4462	5.134	142.35	154.78	89.99	125.57	82.76
5.444	5.133	142.43	154.76	90.04	125.3	82.77

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

در این روابط u پارامتر موقعیت اکسیژن با مقدار تقریبی ۰/۳۸۱ آنگستروم و a پارامتر شبکه است. سایر پارامترها در شکل ۳ قابل مشاهده می‌باشند. طبق جدول ۱ مقادیر زوایای θ_1 تا θ_4 (زوایای مرتبط با برهمکنش‌های ابرتبادلی AB و BB) با افزایش آلایش از $x=0.04$ به $x=0.06$ تغییرات نسبتا قابل ملاحظه‌ای نشان داده‌اند. از آنجایی که افزایش و کاهش مقادیر زوایای بین اتم‌ها ارتباط مستقیمی با افزایش یا کاهش قدرت برهمکنش‌های تبادلی دارد، به نظر می‌رسد حضور فاز ثانویه $PrFeO_3$ میزان قدرت این برهکنش‌ها را تحت تاثیر قرار داده است. علت این که مقادیر زاویه θ_5 تغییر چندانی نشان نداده است حضور یون‌های Pr^{3+} در جایگاه‌های هشت‌وجهی است که تاثیر بیشتری بر قدرت برهمکنش‌های AB و BB و در نتیجه زوایای مرتبط با این برهمکنش‌ها خواهد داشت. مقادیر فواصل بین اتمی نیز تحت تاثیر توزیع کاتیون‌ها در بین زیرشبکه‌های شبکه اسپینلی است.

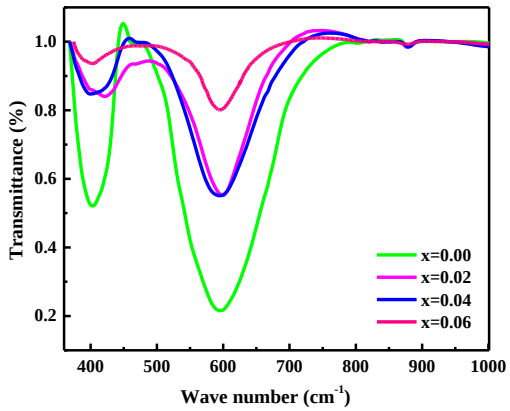


شکل 2 – طیف XRD نمونه‌ها بر حسب میزان آلایش



شکل ۳– طرحی از زوایا و فواصل بین اتمی در جایگاه‌های چهاروجهی و هشت‌وجهی

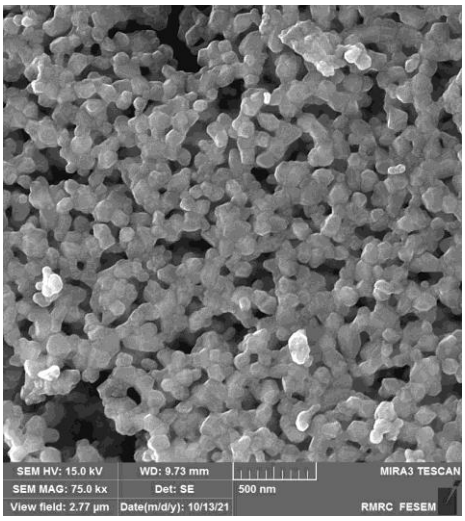
در ادامه، به منظور بررسی بیشتر ویژگی‌های ساختاری نمونه‌ها آنالیز FTIR انجام شد که تصویر مربوط به این آنالیز در شکل 4 موجود است. داده‌های به دست آمده از این آنالیز تایید کننده تشکیل ساختار اسپینل هستند، ضمن اینکه پیک اضافی مبنی بر وجود ناخالصی در طیف FTIR مشاهده نمی‌شود.



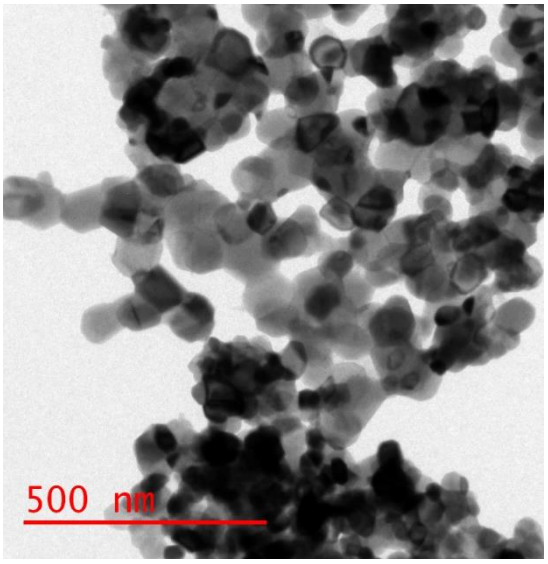
شکل ٤– طیف FTIR نمونه‌ها بر حسب میزان آلایش

تصاویر مربوط به آنالیزهای FESEM و TEM مربوط به نمونه $CoFe_{1.98}Pr_{0.02}O_4$ به ترتیب در شکل‌های ۵ و ٦ نشان داده شده‌اند. شکل‌گیری ذرات کروی شکل با ابعادی در حدود 30-40 nm به خوبی در این تصاویر قابل مشاهده است. آنالیز HRTEM با وضوح بالا جهت مشاهده صفحات بلوری و همچنین امکان محاسبه فاصله بین این صفحات انجام شد. شکل ۷ به خوبی نشان‌دهنده تشکیل صفحات بلوری است که تایید کننده بلورشدگی مناسب در ساختار نانوذرات است. فاصله بین صفحات براگ (d) نیز محاسبه شد که مقادیر به دست آمده به میزان ۰/۱٤٥ نشان‌دهنده صفحات ٤۰۰ و مقدار ۰/۱٥۸ نشان‌دهنده صفحات ٥۱۱ می‌باشند. مشاهده حلقه های موجود در تصویر آنالیز SAED (شکل ۸) بدون وجود حلقه‌های اضافی نیز تاییدکننده بلورشدگی مناسب ساختار اسپینلی در محدوده نانومتر است [3].

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



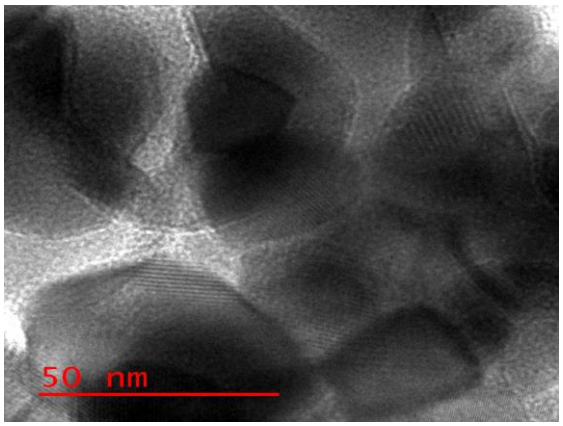
شکل ۵- تصویر FESEM مربوط به نمونه $CoFe_{1.98}Pr_{0.02}O_4$



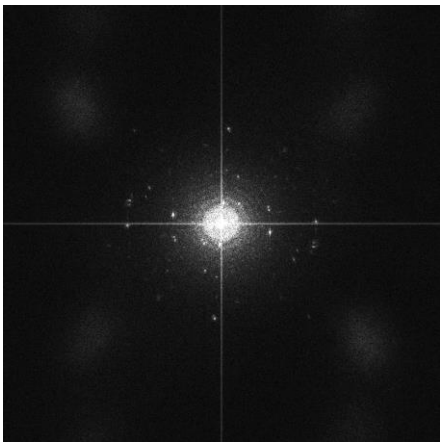
شکل ۶- تصویر TEM مربوط به نمونه $CoFe_{1.98}Pr_{0.02}O_4$

نتیجه‌گیری

در این پروژه نانوذرات فریت کبالت آلاییده شده با کاتیون‌های Pr^{3+} به روش سل‌ژل خوداحتراقی ساخته شدند. آنالیزهای متفاوت ساختاری به منظور اطمینان از شکل‌گیری ساختار اسپینل اتجام شد. نتایج تحلیل‌های XRD و FTIR تایید کننده تشکیل ساختار فریت می‌باشد. مقادیر زوایا و فواصل بین اتمی نیز با بهره-گیری از داده‌های به دست آمده از آنالیز XRD محاسبه شدند. آنالیزهای متفاوتی جهت بررسی مورفولوژی نانوذرات تهیه شده انجام شدند که وجود ذرات کروی شکل با ابعادی نزدیک به داده-های XRD تایید شد. شکل گیری صفحات بلوری با بلورشدگی مناسب نیز توسط تصاویر HRTEM و SAED به تایید رسید.



شکل 7- تصویر HRTEM مربوط به نمونه $CoFe_{1.98}Pr_{0.02}O_4$



شکل 8- تصویر SAED مربوط به نمونه $CoFe_{1.98}Pr_{0.02}O_4$

مرجع‌ها

[1] S. R. Patade, D. D. Andhare, S. B. Somvanshi, S. A. Jadhav, M. V. Khedkar, and K. Jadhav, "Self-heating evaluation of superparamagnetic $MnFe_2O_4$ nanoparticles for magnetic fluid hyperthermia application towards cancer treatment," *Ceramics International*, vol. 46, pp. 25576-25583, 2020.

[2] H. M. T. Farid, I. Ahmad, K. Bhatti, I. Ali, S. M. Ramay, and A. Mahmood, "The effect of praseodymium on Cobalt-Zinc spinel ferrites," Ceramics International, vol. 43, pp. 7253-7260, 2017.

[3] H. Nikmanesh, E. Jaberolansar, P. Kameli, and A. G. Varzaneh, "Effect of praseodymium in cation distribution, and temperature-dependent magnetic response of cobalt spinel ferrite nanoparticles," Nanotechnology, 33 (2022) 275709

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

سنتز، مشخصه‌یابی و بررسی عملکرد فوتوکاتالیستی نانوکامپوزیت مس‌اکسید/گرافن‌اکسید/تیتانیوم دی‌اکسید

کارآمد، علیرضا ؛ سیدیزدی، جمیله؛ حکمت‌آرا، هدی؛ ایران‌نژاد، فاطمه؛ ابراهیمی‌تزنگی، فاطمه؛ نوروزی، میلاد؛ مهدی‌زاده، یوسف

گروه فیزیک دانشگاه ولی‌عصر (عج) رفسنجان

چکیده

در این پژوهش نانوکامپوزیت سه‌تایی مس‌اکسید/گرافن‌اکسید/تیتانیوم دی‌اکسید ($CuO/GO/TiO_2$) سنتز شد و عملکرد فوتوکاتالیستی آن برای تخریب رنگ متیلن‌آبی مورد بحث و بررسی قرار گرفت. آنالیز FTIR وجود پیوندهای مورد انتظار موجود در ماده و عدم وجود ناخالصی را تأیید کرد. داده‌های XRD وجود فازهای تنورایت CuO و آناتاز TiO_2 را در نمونه تأیید کردند. در انتها عملکرد فوتوکاتالیستی نمونه تحت تابش نور فرابنفش برای تخریب متیلن‌آبی مورد سنجش قرار گرفت. آنالیز UV-Vis از زمان‌های مختلف این آزمایش نشان داد که تخریب متیلن آبی در مدت ۹۰ دقیقه به حدود ۸۹ درصد رسید.

واژه‌های کلیدی: *نانوکامپوزیت سه‌تایی، $CuO/GO/TiO_2$ ، تخریب فوتوکاتالیستی، گرافن اکسید، متیلن آبی.*

Synthesis, characterization and investigation of photocatalytic activity of $CuO/GO/TiO_2$ nanocomposite

Karamad, Alireza; Seyedyazdi, Jamileh; Hekmatara, Hoda; Irannezhad, Fatemeh; Ebrahimi-Tazangi, Fatemeh; Norouzi, Milad; Mehdizadeh, Yousef

Department of Physics, Faculty of Science, Vali-e-Asr University of Rafsanjan, Rafsanjan, Iran

Abstract

In this study $CuO/GO/TiO_2$ ternary nanocomposite was synthesized and its photocatalytic activity was examined for degradation of methylene blue (MB). FTIR analysis confirms successful preparation of the desired composite by showing expected bonds. XRD analysis verifies the tenorite CuO and anatase TiO_2 in the sample. Finally the photocatalytic activity of prepared nanocomposite was tested for MB degradation. The UV-Vis analysis shows that the MB degradation was about 89% during 90 minutes.

***Keywords**: Ternary nanocomposite, $CuO/GO/TiO_2$, Photocatalytic activity, Graphene oxide, Methylene blue.*

PACS No. 81

مقدمه

TiO_2 ماده‌ای ارزان، غیر سمی و پایدار با گاف نواری ۳٫۲ eV کاندیدای بسیار خوبی برای فرآیند فوتوکاتالیستی است؛ اما مشکلاتی مانند سرعت بالای بازترکیب زوج الکترون–حفره، بازدهی کم در محدوده نور مرئی است و در عمل می تواند فقط از ۵ درصد انرژی خورشیدی استفاده کند. این مشکل می‌تواند با افزایش دامنه‌ی پاسخ نوری، مثل جفت شدن با نیم‌رساناهای با گاف نواری باریک حل شود [۱–٤].

مس‌اکسید (CuO) به دلیل قیمت ارزان، غیرسمی بودن و سازگاری با محیط زیست مورد توجه قرار گرفته است. CuO متخلخل یک اکسید نیم‌رسانای نوع p با انرژی گاف نواری باریک در حدود ۱٫۲ eV تا ۱٫۷ eV است که می‌تواند به عنوان یک منبع غیرآلی برای تخریب آلاینده‌های آلی تحت تابش نور مرئی در نظر گرفته شود. از طرف دیگر به دلیل اینکه CuO متخلخل ناحیه‌ی سطحی زیادی را ارائه می‌دهد، عملکرد آن بهبود می‌یابد و پایداری بیشتری را نشان می‌دهد [٤, ٥].

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

گرافن یک ماده‌ی متشکل از یک ورقه‌ی دوبعدی از جنس اتم‌های کربن در پیکربندی شش ضلعی است. همچنین تنها ساختار کربنی است که در آن هر اتم کربن توسط یک ابر الکترونی منحصر به فرد با همسایگان خود پیوند خورده و پیوند π دلیل رسانایی الکتریکی بالای آن است. بنابراین وجود گرافن و مشتقات آن مثل گرافن اکسید در نمونه، سرعت الکترون‌ها و در نتیجه سرعت واکنش را افزایش می‌دهد [۵, ۶].

روش آزمایش

در این پژوهش ابتدا اکسید گرافن از روش هامرز بهبود یافته سنتز شد. برای سنتز نانوکامپوزیت مس اکسید/گرافن اکسید/تیتانیوم دی‌اکسید از روش سلووترمال استفاده شد. به طور خلاصه ۲ mL گرافن‌اکسید با غلظت ۰/۵ mg/mL در ۱۰ mL آب دیونیزه پراکنده شد و به مدت ۳۰ دقیقه در حمام فراصوت قرار گرفت؛ سپس ۰/۰۸۱۵ g از ماده‌ی $CuSO_4.5H_2O$ و ۰/۲ g تیتانیوم دی‌اکسید به مخلوط پراکنده شده اضافه شده و به همزنی ادامه داده شد؛ در ادامه ۰/۳ mL محلول $NH_3.H_2O$ و ٤ mL محلول g/mL ۰/۱ ماده‌ی NaOH به مخلوط پراکنده اضافه و در اتوکلاو ۲۵ میلی‌لیتری منتقل شد و به مدت ٤ ساعت در دمای ۱٤۰ درجه سانتی‌گراد قرار گرفت، در مرحله‌ی بعد با آب دیونیزه و اتانول شسته شد و برای آنیل شدن به مدت ۲ ساعت در کوره با دمای ٤۰۰ درجه سانتی‌گراد قرار گرفت.

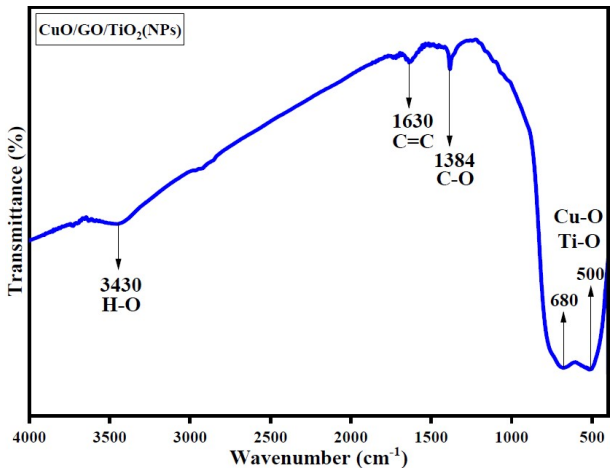
برای بررسی فعالیت فوتوکاتالیستی نمونه، ابتدا g ۰/۰۰۱ متیلن آبی در mL ۳۰ آب دیونیزه حل شد؛ سپس g ۰/۰۱ نانوکامپوزیت سه‌تایی نیز در mL ۳۰ آب دیونیزه پراکنده شد. هر دو محلول در کریستالایزور با هم مخلوط شده و به مدت ۳۰ دقیقه در دمای اتاق و در تاریکی تحت همزن مغناطیسی قرار گرفتند تا جذب سطحی صورت گیرد. یک نمونه از مخلوط برداشته شد و سپس باقی مخلوط تحت نور فرابنفش قرار گرفت و در فواصل زمانی ۱۰ دقیقه، مقدار مشخصی از نمونه در ظروف شیشه ای ریخته شد؛ سپس از آنها آنالیز UV-Vis گرفته و با بدست آوردن «آهنگ واکنش»، میزان عملکرد فوتوکاتالیستی نمونه سنجیده شد. شیب نمودار آهنگ تغییرات k یک پارامتر مناسب برای سنجش عملکرد فوتوکاتالیستی نمونه است؛

$$-k = \mathrm{Ln}(C/C_0) \qquad (۱)$$

که در آن k شیب نمودار، C_0 غلظت اولیه‌ی متیلن آبی و C غلظت متیلن آبی در نمونه است.

نتایج و بحث

آنالیز FTIR نمونه‌ی نانوکامپوزیت سه‌تایی $CuO/GO/TiO_2$ در شکل ۱ آمده است؛ وجود دو قله‌ی مشخص در cm^{-1} ۵۱۰ و cm^{-1} ٦٨٥ به دلیل ارتعاشات پیوندهای فلزی Cu-O و Ti-O است. قله‌ی cm^{-1} ۳٤٤۰ مربوط به پیوندهای H-O مولکول‌های آب جذب شده روی سطح نمونه است.



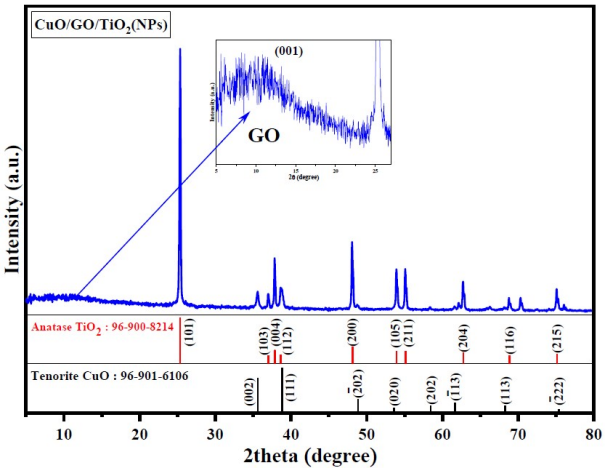
شکل ۱: آنالیز FTIR نانوکامپوزیت $CuO/GO/TiO_2$.

آنالیز XRD نمونه در شکل ۲ آمده است؛ قله‌های ۲θ در ۲۵° و قله‌های مشخصه‌ی سه‌تایی ۳٦° و ۳۷° و ۳۸° و همچنین قله‌های ٤۸° و ٥٤° و ٥٥° و ٦۳° و ٦۸° و ۷۰° و ۷٦° به ترتیب متناظر با (۱۰۱)، (۱۰۳)، (۰۰٤)، (۱۱۲)، (۲۰۰)، (۱۰٥)، (۲۱۱)، (۲۰٤)، (۱۱٦) و (۲۱٥) مربوط به فاز آناتاز TiO_2 با کد رفرنس (۹۸-۹۰۰-۸۲۲٤) هستند.

همچنین مطابق شکل۲ فاز تنورایت مس اکسید تشکیل شده است که مربوط به زوایای 2θ در ۳٥° و ۳۸° و ٤۸° و ٥٤° و ٥۸° و ٦۲° و ٦۸° و ۷٦° به ترتیب مطابق با صفحات (۰۰۲)، (۱۱۱)،

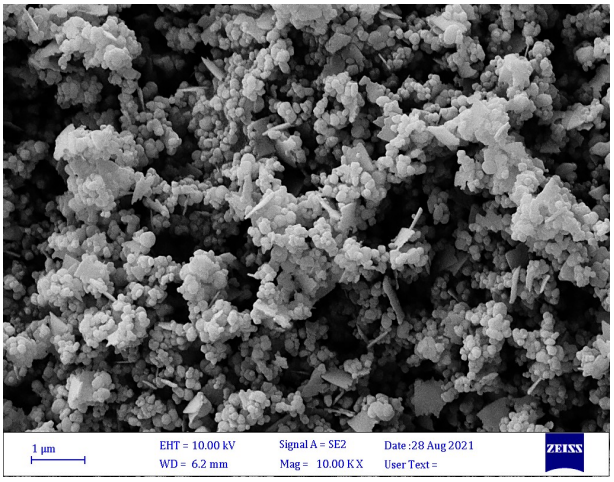
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

(۲۰۲-)، (۰۲۰)، (۲۰۲)،.(۱۱۳-)، (۱۱۳) و (۲۲۲-) تنورایت مس اکسید با کد رفرنس (۹۶-۹۰۱-۶۱۰۶) است.



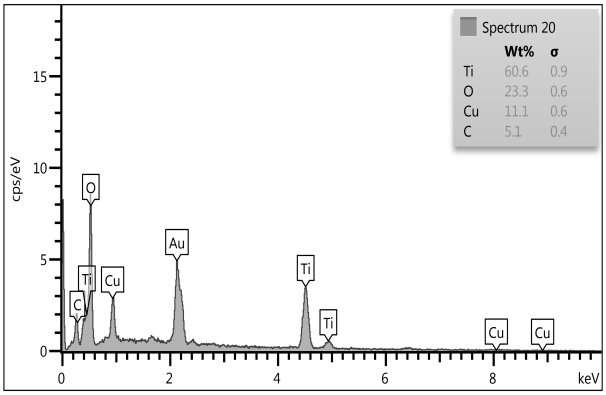
شکل ۲: آنالیز XRD نانوکامپوزیت $CuO/GO/TiO_2$.

تصویر FE-SEM نمونه در شکل ۳ آورده شده است. نانوذرات TiO_2 و صفحات گرافن اکسید به وضوح مشاهده می‌شوند. همچنین ذرات CuO با ابعاد کوچکتر و روی صفحات گرافن اکسید قابل مشاهده هستند.



شکل۳: تصویر EDS نانوکامپوزیت $CuO/GO/TiO_2$.

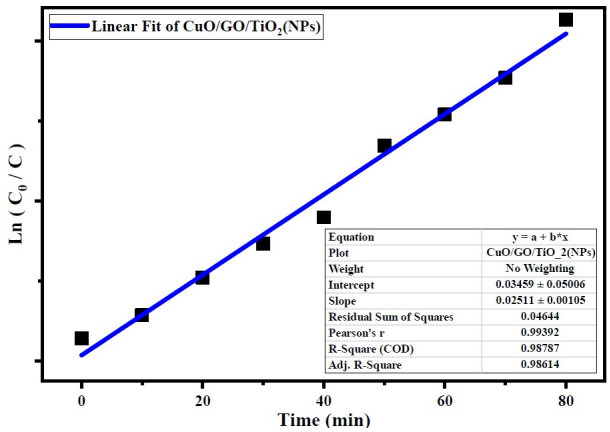
آنالیز EDS نمونه، سنتز موفقیت‌آمیز و بدون ورود ناخالصی به آن را نشان می‌دهد.



شکل ٤: آنالیز EDS نانوکامپوزیت $CuO/GO/TiO_2$.

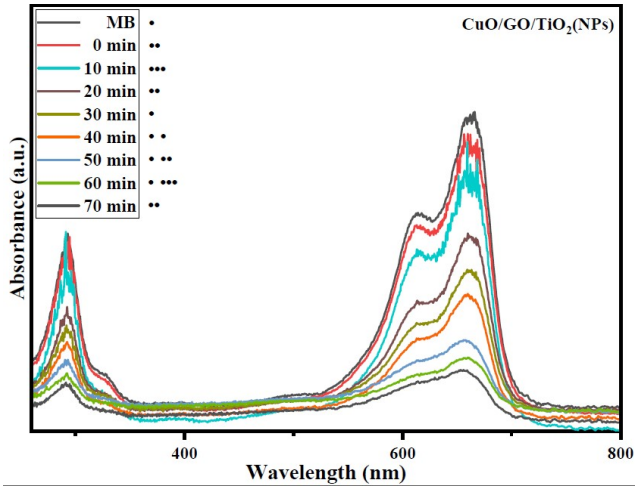
سرعت واکنش نمونه در شکل ۵ نشان داده شده است. به دلیل مرتبه اول بودن واکنش، نمودار به دست آمده بصورت خطی است و شیب نمودار آهنگ واکنش را نشان می‌دهد.

همچنین میزان غلظت متیلن آبی در زمان‌های مشخص با استفاده از داده‌ها در شکل ٤ آمده است. داده‌های میزان تخریب متیلن آبی در جدول ۱ آمده است.



شکل۵: آهنگ عملکرد فوتوکاتالیستی نمونه بر اساس داده‌های UV-Vis.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل ٤: نمودار کاهش غلظت متیلن آبی در زمان‌های مشخص شده در آزمایش.

جدول ۱: آهنگ تخریب فوتوکاتالیستی نانوکامپوزیت سه‌تایی

شماره نمونه	C_0	C	C/C_0	$Ln(C/C_0)$	$\|(C-C_0)\|/C$
I	۳٫۰	۲/٦۱	۰/۸۷	۰/۱۳	٪۱۳
II	۳٫۰	۲/۲٥	۰/۷٥	۰/۲۸	٪۲٥
III	۳٫۰	۱/۷۸	۰/٥۹	۰/٥۱	٪٤۱
IV	۳٫۰	۱/٤٤	۰/٤۸	۰/۷۳	٪٥۲
V	۳٫۰	۱/۲۲	۰/٤۰	۰/۸۹	٪٦۰
VI	۳٫۰	۰/۷۸	۰/۲٦	۱/۳٤	٪۷٤
VII	۳٫۰	۰/٦٤	۰/۲۱	۱/٥۳	٪۷۹
VIII	۳٫۰	۰/٥۱	۰/۱۷	۱/۷٦	٪۸۳
IX	۳٫۰	۰/۳٥	۰/۱۱	۲/۱۳	٪۸۹

نتیجه گیری

در این پژوهش نانوکامپوزیت سه تایی مس‌اکسید/گرافن-اکسید/تیتانیوم دی‌اکسید با موفقیت سنتز شد. با استفاده از آنالیز پراش پرتوی ایکس فازهای تشکیل شده از مس‌اکسید، و تیتانیوم دی‌اکسید، به ترتیب، تنورایت و آناتاز تشخیص داده شد. رای بررسی فعالیت فوتوکاتالیستی نمونه، از متیلن آبی به عنوان یک آلاینده آلی استفاده شد و میزان تخریب آن بررسی شد. نمونه سنتز شده نشان داد که اگر به عنوان فوتوکاتالیست استفاده شود قادر است در مدت زمان ۹۰ دقیقه ۸۹ درصد از آلاینده را از نمونه حذف کند.

مرجع‌ها

[1] Bhanvase, B., T. Shende, and S. Sonawane, A review on graphene–TiO_2 and doped graphene–TiO_2 nanocomposite photocatalyst for water and wastewater treatment. Environmental Technology Reviews, 2017. **6(1)**: p. 1-14.
[2] Fan, W., et al., Fabrication of TiO_2/RGO/Cu_2O heterostructure for photoelectrochemical hydrogen production. Applied Catalysis B: Environmental, 2016. **181**: p. 7-15.
[3] Li, D., et al., Preparation and photocatalytic performance of TiO_2-RGO-CuO/Fe_2O_3 ternary composite photocatalyst by solvothermal method. Materials Research Express, 2021. **8(1)**: p. 015025.
[4] Wang, N., et al., Photocatalytic TiO_2/rGO/CuO Composite for wastewater treatment of Cr (VI) under visible light. Water, Air, & Soil Pollution, 2020. **231(5)**: p. 1-10.
[5] Zhao, J., et al., Novel synthesis of nano needle-like Cu_2O-GO-TiO_2 and CuO-GO-TiO_2 for the high photocatalytic performance of anionic and cationic pollutants. Solid State Sciences, 2019. **91**: p. 77-88
[6] Hosseini, S.A. and S. Babaei, Graphene oxide/zinc oxide (GO/ZnO) nanocomposite as a superior photocatalyst for degradation of methylene blue (MB)-process modeling by response surface methodology (RSM). Journal of the Brazilian Chemical Society, 2017. **28**: p. 299-307.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تولید پالس آتوثانیه قطبیده بیضوی از برهم‌کنش لیزر فمتوثانیه با کلرین

مدهنی، احمدرضا[۱]؛ ایرانی، الناز[۱]؛ منفرد، محمد[۲]؛ صادقی فراز، امین[۱]

[۱] دانشکده علوم پایه گروه اتمی-مولکولی دانشگاه تربیت مدرس، خیابان جلال آل احمد، تهران

[۲] انستیتو نظریه ماده چگال و اپتیک، دانشگاه فردریچ-شیلر ینا، ینا، آلمان

چکیده

در این مقاله، تولید پالس آتوثانیه قطبیده بیضوی طی فرآیند برهم‌کنش مولکول کلرین با پالس لیزری پرشدت قطبیده بیضوی بررسی شده است. محاسبات مربوطه بر پایه نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان در فضای حقیقی سه بعدی انجام شده است. نتایج نشان می دهد که با استفاده از یک پالس لیزر قطبیده بیضوی به عنوان محرک، امکان تولید و کنترل هماهنگ‌های مرتبه بالا با قطبش های بیضوی متفاوت و در نتیجه تولید پالس آتوثانیه قطبیده بیضوی وجود دارد. مقایسه شدت مولفه‌های راست‌گرد و چپ‌گرد هماهنگ‌های ناحیه قطع، اختلاف شدتی در حدود یک مرتبه بزرگی و کمتر را نشان می دهد. همچنین پارامتر قطبش پذیری به ازای هر هماهنگ محاسبه و نمایش داده شده است. با استفاده از لیزر محرکی با پارامتر قطبش‌پذیری ۰/٤ و انتخاب هماهنگ‌های مناسب، پالس آتوثانیه قطبیده بیضوی با پارامتر قطبش‌پذیری ۰/۵۵- قابل دستیابی است.

واژه های کلیدی: *پالس آتوثانیه قطبیده بیضوی، تولید هماهنگ¬های مرتبه بالای دایروی، مولکول کلرین، نظریه تابعی چگالی وابسته زمانی*

Elliptical attosecond pulse generation from femtosecond laser interaction with chlorine

Madhani, Ahmad Reza[1]; Irani, Elnaz[1]; Monfared, Mohammad[2]; Sadeghi Faraz, Amin[1]

[1] *Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Tarbiat Modares University, P.O. Box 14115-175, Tehran, Iran.*
[2] *Institute of Condensed Matter Theory and Optics, Friedrich-Schiller-University Jena, Max-Wien-Platz 1, Jena D-07743, Germany.*

Abstract

In this paper, the elliptical attosecond pulse generation by the interaction of chlorine molecule with high-intensity elliptical polarized laser pulse has been investigated. The calculations are performed based on the time-dependent density functional theory in three-dimensional real space. The results show that by using an elliptically polarized driving laser pulse, one can generate and control high-order harmonics with different ellipticities, and consequently can produce an elliptically polarized attosecond pulse. Comparing the intensity of left- and right-circularly-polarized harmonic components around the cut-off frequency shows a difference about one order of magnitude or less. Also, the ellipticity of each harmonic order has been calculated and analyzed. By selecting appropriate harmonics, an elliptical attosecond pulse with an ellipticity of -0.55 is achievable.

***Keywords**: Elliptical attosecond pulse, Circularly high-order harmonics generation, Chlorine molecule, Time dependent density functional theory*

PACS No. *33*

مقدمه

تولید هماهنگ‌های مرتبه بالا یک فرآیند غیرخطی است که نور پرشدت مادون قرمز را به تابش XUV و اشعه ایکس نرم تبدیل می‌کند که پهنای زمانی پالس تولید شده در مرتبه آتوثانیه می‌باشد. این روش به دلیل طول موج و پهنای زمانی بسیار کوتاه منتج، یک ابزار ایده‌آل برای ثبت دینامیک بار سریع و چرخش آن در سیستم-

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

های اتمی، مولکولی و ماده چگال است. تولید هماهنگ‌های مرتبه بالای دایره‌ای یا بیضوی و پالس‌های آتوثانیه XUV متناظر با آن کاربردهای متعددی از جمله کاوش پدیده‌های خاص کایرال مانند تشخیص کایرال از طریق دورنگی دایره‌ای فوتوالکترون و مطالعه دینامیک ویژه کایرال فوق سریع در مولکول‌ها را دارد[1]. تا به امروز، روش‌های متعددی برای تولید پالس‌های آتوثانیه به صورت تجربی ارائه شده است. اما مساله قطبش و همدوسی پالس آتوثانیه بدست آمده جز مسائلی هست که هنوز چالش‌های زیادی در مورد آن مطرح است. لذا در این پژوهش سعی شده است به آن پرداخته شود. یکی از روش‌های تولید پالس آتوثانیه قطبیده استفاده مستقیم از یک میدان لیزری قطبیده بیضوی است. در واقع هارمونیک‌های مرتبه بالا با قطبش بیضوی را می‌توان تولید کرد و میزان قطبش پذیری آن با پارامتر بیضی بودن لیزر افزایش می یابد]۲[. تولید هماهنگ‌های مرتبه بالا توسط مدل نیمه کلاسیکی کرکوم که به مدل سه گام معروف است، توجیه می‌شود. مطابق با این نظریه، الکترون‌های سیستم اتمی یا مولکولی که در معرض تابش میدان قوی لیزر قرار می‌گیرند، به روش تونل‌زنی یونیزه می‌شوند. این الکترون‌ها در میدان الکتریکی لیزر شتاب می‌گیرند و با تغییر جهت میدان به یون مادر باز می‌گردند. نهایتا در هنگام بازترکیب با یون مادر، تمام انرژی جنبشی کسب شده خود در میدان الکتریکی لیزر بعلاوه انرژی یونیزاسیون را بصورت یک فوتون با انرژی بالاتر از انرژی فوتون میدان تابشی گسیل می‌کنند. پرانرژی‌ترین فوتون گسیل شده در این فرآیند به فرکانس قطع معروف است که مقدار آن برابر با می‌باشد که در آن انرژی یونیزاسیون سیستم اتمی یا مولکولی و انرژی پاندرماتیو لیزر است[3].

در این پژوهش، میزان قطبش پذیری هماهنگ‌های مرتبه بالا و پالس آتوثانیه متناظر با آن در برهم‌کنش پالس لیزری پرشدت با مولکول کلرین مورد مطالعه قرار گرفته است.

روش محاسباتی

به کمک نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان(TDDFT) و حل معادله کوهن-شم می‌توان این برهم‌کنش را بررسی کرد[۳]:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi_i(r,t)=\left[-\frac{\nabla^2}{2}+v_{ks}[n](r,t)\right]\psi_i(r,t) \quad (۱)$$

$$v_{ks}[n](r,t)=v_H[n](r,t)+v_{xc}[n](r,t)+v_{ext}(r,t)+v_{ne}(r) \quad (۲)$$

$$n(r,t)=\sum_{i=1}^{N}\psi_i^*(r,t)\,\psi_i(r,t) \quad (۳)$$

در روابط فوق، $v_{ks}[n](r,t)$ پتانسیل کوهن-شم وابسته به زمان است که به ترتیب شامل پتانسیل‌های هارتری، تبادلی-همبستگی، خارجی و برهم کنشی الکترون و هسته می‌باشد و n(r,t) چگالی الکترونی وابسته به زمان است. این معادله در دستگاه واحد اتمی (ħ=m=e=1) قرار دارد. محاسبات توسط نرم‌افزار محاسباتی اختاپوس(Octopus) انجام می‌گیرد و شتاب دوقطبی وابسته به زمان به کمک مقدار میانگین قضیه اهرنفست محاسبه می‌شود[٤و٥]:

$$\mathbf{A_q}(t)=-\left\langle\psi(t)\left|\left|H(t),[H(t),q]\right|\right|\psi(t)\right\rangle \quad (٤)$$

q دارای مقادیر x، y و z می‌باشد. با استفاده از تبدیل فوریه شتاب دوقطبی، طیف هماهنگ‌ها بدست می‌آید:

$$a_q(\omega_n)=\int\mathbf{A_q}(t)\exp(-i\,\omega_n t)dt \quad (٥)$$

با $\omega_n=\frac{2n\pi}{T_0}$ ، n=1,2,... که T_0 چرخه اپتیکی میدان لیزر پایه می‌باشد. شدت مولفه های دایروی راست‌گرد و چپ‌گرد هماهنگ‌ها با استفاده از رابطه (٥) به صورت زیر قابل دست‌یابی است:

$$I_{\pm}=|a_{\pm}|^2 \quad (٦)$$

به طوری که

$$a_{\pm}=\frac{1}{\sqrt{2}}(a_x\pm ia_y) \quad (٧)$$

می‌باشد. به کمک رابطه زیر می‌توان پارامتر قطبش پذیری را محاسبه کرد:

$$\varepsilon=\frac{|a_+|-|a_-|}{|a_+|+|a_-|} \quad (٨)$$

که مقدار آن از ۱- تا ۱ متغیر است. به کمک این معادله مقدار پارامتر قطبش‌پذیری هر هماهنگ قابل محاسبه است.

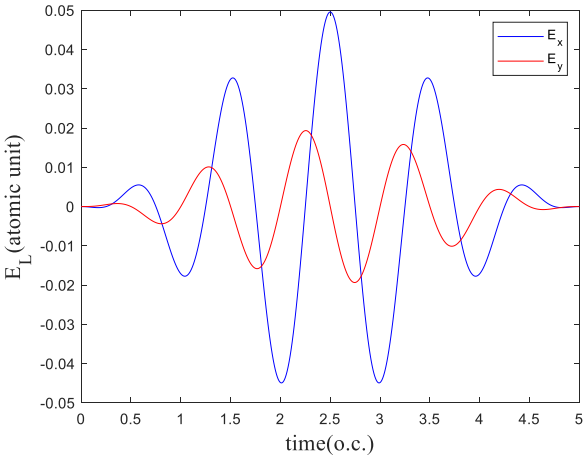
در نهایت شدت پالس آتوثانیه خروجی در فضای زمان از رابطه زیر پیروی می‌کند[۳]:

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$$I(t)=\left|\sum_{q}\mathbf{a_q}\,e^{iq\omega_0 t}\right|^2 \qquad (۹)$$
$$10^{14}\,W/cm^2$$

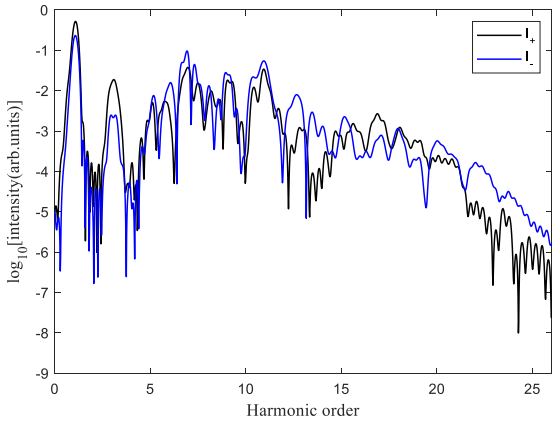
نتایج

با برهم‌کنش پالس لیزری قطبیده بیضوی با پارامتر قطبش‌پذیری ۰/٤، طول موج 800nm، شدت $10^{14}\,W/cm^2$ و تعداد ۵ چرخه اپتیکی با مولکول کلرین، قطبش هماهنگ‌های مرتبه بالای حاصل شده خروجی اندازه‌گیری شده است. شکل ۱ طرح‌واره‌ای از پالس تحریکی فرودی می‌باشد. ابعاد جعبه شبیه سازی ۳۵×۳۵×۹۰ (در واحد اتمی) می‌باشد که مولکول در راستای x و در مرکز جعبه قرار دارد و گام‌های زمانی و فضایی به ترتیب، ۰/۱ و ۰/۳۵ واحد اتمی در نظر گرفته شده است.



شکل ۱ : مولفه‌های x و y میدان الکتریکی اعمال شده به مولکول کلرین

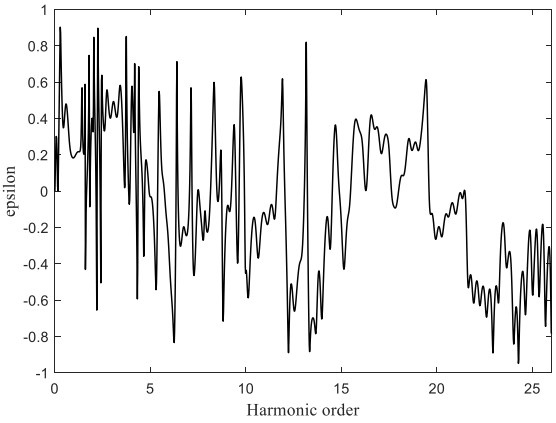
پالس‌های لیزری متفاوتی با پارامتر قطبش پذیری از ۰ تا ۱ مورد آزمایش قرار گرفت و دلیل استفاده از پالس قطبیده بیضوی با پارامتر قطبش‌پذیری ۰/٤، واضح بودن شکل قطبش و عدم چرخش زیاد قطبش پالس آتوثانیه خروجی در بازه هماهنگ‌های انتخابی می‌باشد. شکل ۲ طیف هماهنگ‌های قطبیده‌ی دایره‌ای چپ (آبی) و هماهنگ‌های قطبیده‌ی دایره‌ای راست (سیاه) را نشان می‌دهد که به کمک معادله (٦) بدست می‌آیند.



شکل۲ : مولفه‌های راست‌گرد (سیاه) و چپ‌گرد (آبی) طیف هماهنگ‌های مرتبه بالای قطبیده بیضوی حاصل از برهم‌کنش پالس پرشدت لیزری با مولکول کلرین.

نکته قابل توجه در شکل ۲ برتری شدت مولفه چپ هماهنگ‌ها در ناحیه فرکانس قطع می‌باشد که منجر به منفی بودن پارامتر قطبش‌پذیری مجموع در این ناحیه می‌شود.

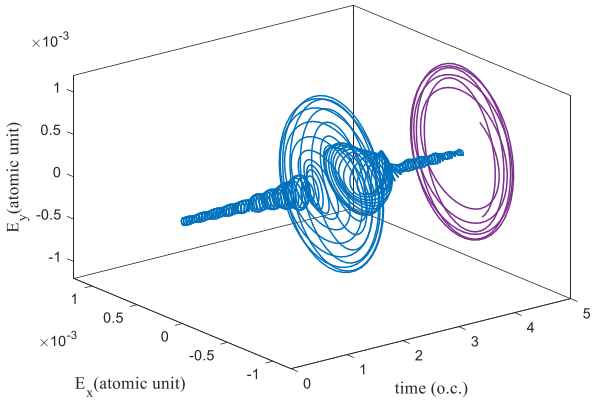
پارامتر قطبش‌پذیری برای هماهنگ‌های مختلف طبق رابطه (۸) محاسبه و در شکل ۳ نشان داده شده است. بیشترین مقدار پارامتر قطبش‌پذیری مربوط به هماهنگ ۲٤ام است که مقدار آن برابر با ۰/۹٤- می‌باشد. محاسبات و شبیه‌سازی‌های مشابه برای پالس فرودی قطبیده خطی حاکی از آن است که پارامتر قطبش‌پذیری برای این حالت تقریبا صفر است و در نتیجه قطبش پالس آتوثانیه حاصل نیز تقریبا خطی است.



شکل۳ : مقادیر پارامتر قطبش‌پذیری برای هماهنگ‌های مرتبه بالا.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

همانگونه که از شکل ۳ مشخص است، تغییر مقدار پارامتر قطبش‌پذیری بین مثبت و منفی به معنی تغییر از چرخش راست‌گرد به چپ‌گرد و بالعکس تا قبل از هماهنگ‌های نزدیک به فرکانس قطع زیاد است. به عبارت دیگر، پالس آتوثانیه خروجی ناشی از هماهنگ‌های ناحیه قطع که در آن شدت هماهنگ‌های قطبیده بیضوی چپ‌گرد بیشتر است، دارای یک قطبش منفی و کند تغییر نسبت به زمان است که نتیجه آن حصول یک پالس قطبیده بیضوی مطلوب می‌باشد. شکل ٤ میدان الکتریکی پالس آتوثانیه خروجی از انتخاب هماهنگ ۲۲ام تا ۲٦ام را به تصویر می‌کشد.



شکل٤ : طرح‌واره‌ی سه بعدی میدان الکتریکیِ پالس آتوثانیه حاصل از انتخاب هماهنگ‌های ۲۲ام تا ۲٦ام.

با اندازه‌گیری نسبت محور کوچک‌تر به محور بزرگ‌تر میدان الکتریکی پالس آتوثانیه قطبیده بیضوی خروجی، مقدار پارامتر قطبش‌پذیری این پالس برابر با ۰/۵۵- می‌باشد.

نتیجه گیری

در این پژوهش، تولید هماهنگ‌های مرتبه بالای قطبیده دایروی، بیضوی و پالس آتوثانیه قطبیده بیضوی منتج از آن طی فرآیند برهم‌کنش مولکول کلرین با پالس لیزر فمتوثانیه پرشدت با پارامتر قطبش‌پذیری ۰/٤ مورد بررسی قرار گرفت. نتایج بدست آمده حاکی از آن است که در ناحیه فرکانس قطع، شدت مولفه دایروی چپ‌گرد هماهنگ‌ها بیشتر از مولفه راست‌گرد آن‌ها است. در نتیجه با برهم‌نهی هماهنگ‌های این محدوده می‌توان پالس آتوثانیه با قطبش بیضوی و پارامتر قطبش‌پذیری ۰/۵۵- تولید کرد.

مرجع‌ها

[۱] Chon-Teng Belmiro Chu, Yae-Lin Sheu, and Shih-I Chu, "Bayesian optimal control of the ultrashort circularly polarized attosecond pulse generation by two-color polarization gating," *Opt. Express* **29**, 32900-32909 (2021)

[۲] Strelkov, V. V., et al. (2012). "High-order harmonic generation by atoms in an elliptically polarized laser field: Harmonic polarization properties and laser threshold ellipticity." *Physical Review* A **86**(1): 013404.

[۳] محمد منفرد، الناز ایرانی، رسول صدیقی، محمدکاظم مروج‌فرشی (۲۰۲۰). "بررسی اثر برهم‌کنش‌های تبادلی و همبستگی در طیف هماهنگ‌های مراتب بالا." *مجله علوم و فنون هسته ای* **٤١**(٤): ١-١٠.

[٤] M.A.L. Marques, Alberto Castro, George F. Bertsch, and Angel Rubio, octopus: a first-principles tool for excited electron-ion dynamics, *Comput. Phys*. Commun. **151** 60-78 (2003)4.

[٥] Sun, N., et al. (2020). "Near-circularly-polarized attosecond pulse generation from carbon monoxide molecules with a combination of linearly and circularly polarized fields." *Physical Review* A **101**(5): 053437.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی شرط جورشدگی فاز برای ترکیب چهارموج در موجبرهای پله‌ای سیلیکون در ناحیه تراهرتز

پاکارزاده، حسن[۱]؛آذرگون، مهدی[۱]؛امینی، طاهره[۲]؛ جهانگیری، فاضل[۲]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شیراز ، شیراز

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

چکیده

در این مقاله، یک موجبر پله‌ای سیلیکونی مبتنی بر بلور فوتونی با طول موج پاشندگی صفر (ZDW) در ناحیه تراهرتز طراحی می‌شود که به خاطر داشتن سطح مقطع موثر مدی کوچک، دارای ضریب غیرخطی بزرگی می‌باشد. پس از توضیح چگونگی طراحی موجبر و بدست آوردن مشخصه‌های خطی و غیر خطی مدهای اصلی آن (مد عرضی الکتریکی (TE)[۲]و مد عرضی مغناطیسی (TM)[۳]) از جمله پاشندگی، افت و پارامتر غیرخطی، شرط جورشدگی فاز و بهره برای ترکیب چهار موج (FWM)[۴] در ناحیه تراهرتز را مورد تحلیل و بررسی قرار می‌دهیم.

واژه های کلیدی:*تراهرتز، بلور فوتونی، موجبر سیلیکونی، صفر پاشندگی، ترکیب چهار موج، جورشدگی فاز*

Investigation of phase matching condition of four-wave mixing (FWM) in rib silicon waveguides in terahertz region

Pakarzadeh, Hassan[1] ; Azargoon, Mehdi[1] ; Amini, Tahereh[2]; Jahangiri, Fazel[2]

[1]*Department of Physics, Shiraz University of Technology, Shiraz*

[2]*Laser and Plasma Research Institute, Shahid Beheshti University, Tehran*

Abstract

In this paper, a photonic crystal-based rib silicon waveguide is designed with a zero-dispersion wavelength (ZDW) in the Terahertz region which has a large nonlinear coefficient due to having a small effective mode area. After explaining how to design the waveguide and obtaining linear and nonlinear characteristics of the main modes (transverse electric (TE) and transverse magnetic (TM) modes) such as dispersion, loss, and nonlinear parameter, we investigate the phase-matching condition and gain for the four-wave mixing (FWM) in the Teraherrz region.

Keywords: *terahertz, photonic crystal, silicon waveguide, zero dispersion, four-wave mixing, phase matching*

[1] zero-dispersion wavelength
[2] transverse electric
[3] transverse magnetic
[4] four-wave mixing

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مقدمه

تابش تراهرتز، امواج الکترومغناطیسی هستند که در محدوده ۰٫۱–۱۰ THz قرار دارند که به این ناحیه شکاف تراهرتز گفته می‌شود. امروزه این امواج دارای کاربردهای فراوانی، از جمله: تصویربرداری، امنیت، فناوری اطلاعات، طیف سنجی و... هستند. برای تولید، انتشار و تقویت امواج تراهرتز از مواد غیرخطی استفاده می‌کنند که در میان مواد غیرخطی سیلیکون مادهٔ مناسبی برای ساخت موجبر می‌باشد. ضریب جذب سیلیکون حدود $0,23\ cm^{-1}$ در بازه طول موجی ۳۰۰–۲۵ μm است که نسبت به تار نوری معمولی(سیلیکا) که ضریب جذب آن حدود $5\ cm^{-1}$ است دارای افت کمتری است. سیلیکون ضریب شکست خیلی بزرگتری (تقریبا ۳,۵) نسبت به ضریب شکست هوا دارد که باعث حبس شدگی نور در موجبر می‌شود. ماهیت بلوری سیلیکون باعث می‌شود که پراکندگی رامان وابسته به هندسه و قطبش مد باشد که در حالت TM در موجبر سیلیکونی پراکندگی رامان نخواهیم داشت. این ماده در طول موج‌های بیشتر از ۱۱۰۰ nm شفاف است. این ویژگی‌های منحصر به فرد، سیلیکون را گزینهٔ مناسبی برای ساخت موجبر کرده است [۲،۱]. موجبرها بخشی از مدارهای فوتونیکی هستند که باعث برهمکنش فوتون با مواد غیرخطی می‌شوند و علاوه بر اینکه موج را محبوس می‌کنند، باید شرط تک مد بودن هم برای آن برقرار باشد:

$$\frac{W}{H}\leq 0.3+\frac{r}{\sqrt{1-r^2}} \qquad (۱)$$

که W پهنای پله، H فاصله از بالای ساختار بلور فوتونی تا انتهای پله است و همچنین در این رابطه $r=\frac{(H-h)}{H}$ می‌باشد[۳] .

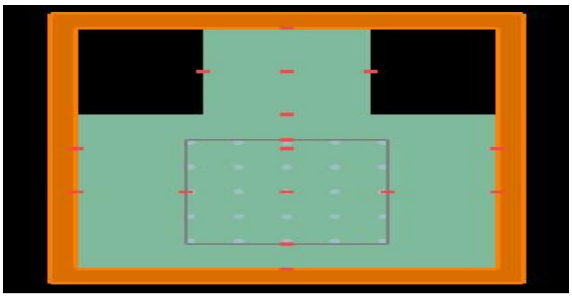
طراحی موجبر پله ای سیلیکون

در این مقاله، موجبر پله ای سیلیکون بر اساس بلور فوتونی با هدف معرفی ساختار بهینه با حبس شدگی بالای موج تراهرتز و همچنین، سطح مقطع موثر مد بسیار کوچک به همراه افت مناسب طراحی شده است. برای طراحی از ماژول مد سلوشن (mode solution) نرم افزار لومریکال (lumerical) استفاده می‌کنیم.

پاشندگی ساختار با استفاده از ضریب شکست وابسته به طول موج، با توجه به ضرایب سلمایر ماده سیلیکون، بدست آمده است[۲] :

$$n^2-1=\frac{10.6684293\lambda^2}{\lambda^2-0.301516485^2}+\frac{0.00304347 48\lambda^2}{\lambda^2-1.13475115^2}+\frac{1.54133408\lambda^2}{\lambda^2-1104^2} \qquad (۲)$$

مطابق با شکل ۱، موجبر طراحی شده دارای ماده زمینه سیلیکونی و یک قسمت پله‌ای به عرض $W=۲۸\ \mu m$ و همچنین، یک آرایه بلور فوتونی 5×5 با ثابت شبکه $\Lambda_x=۸\ \mu m$ و $\Lambda_y=۸\ \mu m$ با حفره-های هوا است. فاصلهٔ آرایه‌های بلور فوتونی تا انتهای پله موجبر $H = ۳۶,۱۵\ \mu m$است. شرایط مرزی با استفاده از یک لایهٔ PML تعریف شده است.



شکل۱:موجبر طراحی شده در نرم افزار لومریکال.

بررسی مدهای اصلی موجبر

مدهای اصلی حائز اهمیت هستند، چرا که مدهای مراتب بالاتر در نواحی اطراف نفوذ کرده وافت بالایی دارند. شکل۲ مدهای اصلی ساختار طراحی شده در این مقاله را نشان می‌دهد.

رابطهٔ (۳) ضریب غیر خطی موجبر را محاسبه می‌کند که در آن λ_0 طول موج پمپ، $n_2=5\times10^{-18}\frac{m^2}{w}$ ضریب شکست غیرخطی سیلیکون[۳] و A_{eff} سطح مقطع موثر مد است که از نرم افزار لومریکال به دست می‌آید.

$$\gamma=\frac{n_2\omega_0}{cA_{eff}}=\frac{2\ n_2\ \pi}{\lambda_0 A_{eff}} \qquad (۳)$$

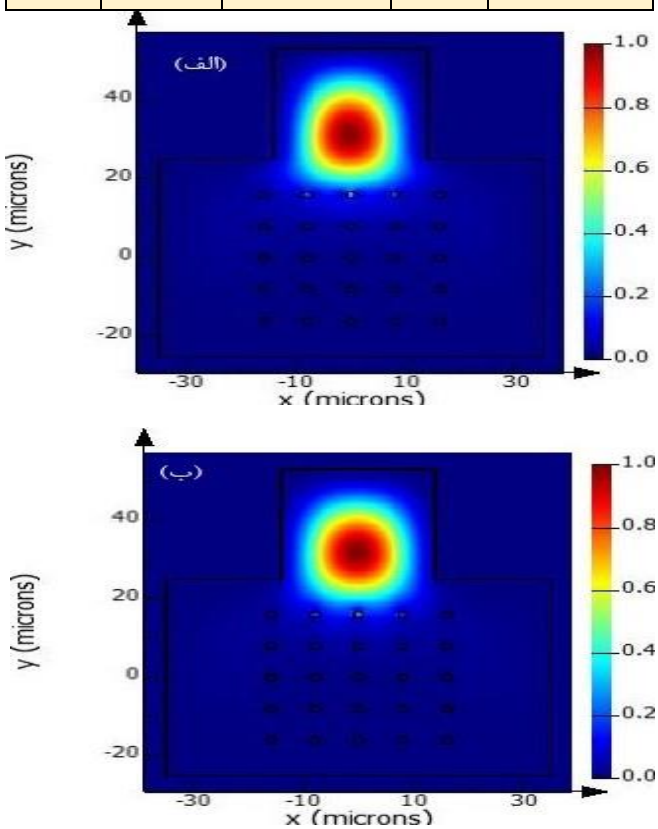
جدول۱ مشخصه های دو مد اصلی را نشان می‌دهد. برای بررسی شرط جورشدگی فاز نیاز به β_2 وپاشندگی‌های مراتب بالاتر است که β_2 را از رابطه‌ی $\beta_2=\frac{-\lambda_0^2\ D}{2\pi c}$ و برای به دست آوردن پاشندگی‌های

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مراتب بالاتر از رابطه $\beta_m=\frac{d^m\beta}{d\omega^m}$ ، $m= ۱،۲،۳...$ استفاده می‌کنیم [۳].

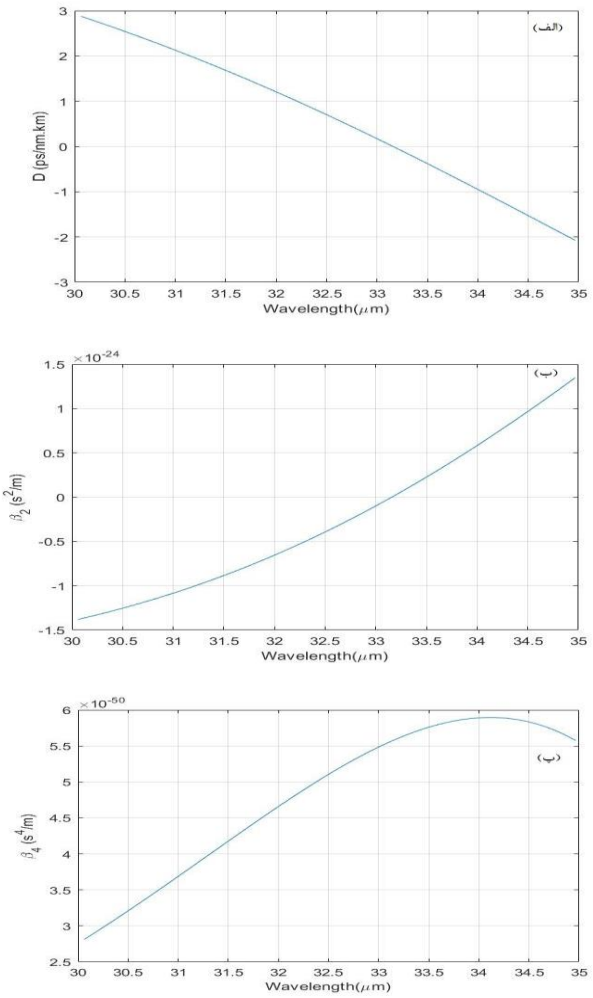
جدول۱:مشخصه های مدهای اصلی

مدهای موجبر	افت (dB/cm)	سطح مقطع موثر (μm^2)	ضریب شکست	طول موج صفر پاشندگی (μm)
مد TE	۰,۰۱	۷۳۱,۶	۳,۳۵	۳۳,۱۳۵
مد TM	۰,۰۰۶	۶۹۵,۲	۳,۳۶	۳۳,۱۳۵



شکل۲:(الف) مد TE (ب)مد TM موجبر.

به دلیل اهمیت پاشندگی و ضرایب پاشندگی مرتبه دوم و مراتب بالاتر برای بررسی شرط جورشدگی فاز، نمودارضرایب پاشندگی مراتب زوج در شکل۳ آورده شده است. در مقایسه دو مد اصلی TE و TM به دلیل اینکه مد TM در موجبر طراحی شده، سطح مقطع و افت کمتری نسبت به مد TE دارد و عدم وجود پراکندگی رامان در موجبرهای سیلیکونی در حالت TM، افت ناشی از پراکندگی رامان حذف خواهد شد. بنابراین، در این مقاله مد TM را انتخاب می‌کنیم. نمودارهای شکل۳ همگی مربوط به مد TM می‌باشد.



شکل۳: (الف)نمودار پاشندگی مد TM (ب-پ) به ترتیب نمودار ضریب پاشندگی مرتبه دوم، ضریب پاشندگی مرتبه چهارم مربوط به مد TM.

شرط جور شدگی فاز در ترکیب چهار موج(FWM)

برای تحقق بخشیدن به جورشدگی فاز در فرایند ترکیب چهارموج در موجبرهای سیلیکونی نیاز به طول موج پمپ نزدیک به طول موج صفر پاشندگی در رژیم پاشندگی غیر عادی است، به همین منظور از آنجا که طول موج صفر پاشندگی ما ۳۳,۱۳۵μm می‌باشد ما طول موج پمپ را ۳۳ μm انتخاب می‌کنیم(شکل۳ (الف)). از اصل بقای انرژی برای ترکیب چهار موج استفاده می‌کنیم که شامل دو فوتون پمپ در فرکانس زاویه ای ω_p که انرژی خود را به موج سیگنال با فرکانس زاویه ای ω_s وموج آیدلر با فرکانس زاویه ای ω_i منتقل می‌کند:

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$$2\omega_p - \omega_s - \omega_i = 0 \quad (٤)$$

$$k_s + k_i - 2k_p + k_{NL} = 0 \quad (٥)$$

در رابطه (٥) k_s ،k_t ،k_p عدد موج‌های سیگنال، آیدلر و پمپ هستند و k_{NL} عدم جورشدگی فاز غیر خطی که توسط مدولاسیون خود فازی (SPM) و مدولاسیون فاز متقابل (XPM) ایجاد می‌شود، همچنین می‌توانیم $k_L = k_s + k_i - 2k_p$ را به عنوان عدم جورشدگی فاز خطی تعریف کنیم. از آنجا که امواج سیگنال و آیدلر به صورت متقارن اطراف فرکانس پمپ قرار دارند جورشدگی فاز خطی تنها به پارامترهای پراکندگی مرتبهٔ زوج بستگی دارند.

$$k_L = \beta_{2p}\Omega_{sp}^2 + 2\sum_{m=2}^{\infty}\frac{\beta_{2mp}}{(2m)!}\Omega_{sp}^{2m} \quad (٦)$$

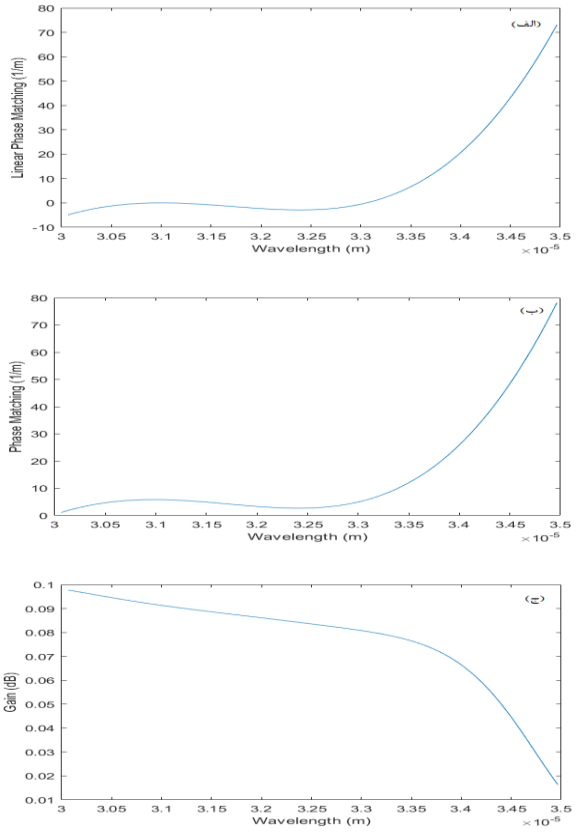
در معادل(٦) β_{2p} پاشندگی سرعت گروه (GVD) وβ_{2mp} پاشندگی مراتب زوج بالاتر در فرکانس پمپ هستند و Ω_{sp} فرکانس جابجایی سیگنال وپمپ است[٤] . همچنین، $\Delta k_{NL} = 2\gamma(\omega)P$ است که P قلهٔ توانی موج پمپ است. با توجه به اینکه بهره در فرایند ترکیب چهار موج به صورت

$$G = 1 + \left[\frac{\gamma P}{g}\sinh(gL)\right]^2 \quad (٧)$$

تعریف می‌شود که در آن

$$g = \left[\gamma P\Delta k_L - \left(\frac{\Delta k_L}{2}\right)^2\right]^{1/2} \quad (٨)$$

برای داشتن بیشینه بهره باید g به صفر نزدیک باشد و برای تحقق این امر جورشدگی فازی نزدیکترین مقدار ممکن به صفر را داشته باشد. در ساختار معرفی شده در این مقاله، با توجه به رفتار پاشندگی ساختار، طول موج پمپ، سیگنال و ایدلر به ترتیب μm ٣٣، μm ٣١ و μm ٣٥,٣ انتخاب شده است. شکل ٤ نمودارهای جورشدگی فازی خطی، جورشدگی فازی غیرخطی و بهره را نشان می‌دهد که در شکل٤(الف)جورشدگی فاز خطی $-٠,٣١\ \frac{1}{m}$ و شکل٤ (ب) با در نظر گرفتن قلهٔ توان پمپ W ٢٠٠٠ ، جورشدگی فازی کل $٥,١٦\ \frac{1}{m}$ به دست آمد که شرط جورشدگی فاز را برآورده کرده است و شکل٤ (ج) هم نمایانگر بهره پارامتری در طول موج سیگنال است.



شکل٤:نمودارهای(الف)جورشدگی فاز خطی،(ب)جورشدگی فاز کل،(ج) بهره.

نتیجه گیری

با طراحی یک موجبر پله ای سیلیکونی مبتنی بر بلور فوتونی با طول موج صفر پاشندگی در ناحیه تراهرتز و در نظر گرفتن طول موج پمپ نزدیک به صفر پاشندگی، برای اولین بار شرط جورشدگی فاز خطی، جورشدگی فاز کل و بهره پارامتری در طول موج سیگنال بررسی شد. نتایج بدست آمده نشان دهندهٔ انجام تقویت پارامتری بر پایهٔ ترکیب چهار موج در موجبر پیشنهادی است.

مراجع

[١] S. Li; G. Kumar and T. E. Murphy; "Terahertz nonlinear conduction and absorption saturation in silicon waveguides"; *Optica* **2**,NO. 6,(2015) 553-557.

[٢] Z. Wang; H. Liu; N. Huang; Q. Sun and J. Wen; "Efficient terahertz-wave generation via four-wave mixing in silicon membrane waveguides"; *Optics express* **20**, NO. 8, (2012) 8920-8928.

[٣] H. Pakarzadeh and F. Akbari; "Propagation of Terahertz Pulses in Photonic Crystal-Based Rib Silicon Waveguides"; *Silicon* **14**,NO. 6,(2022) 2931-2940.

[٤] T. Amini and F. Jahangiri; "Regenerative terahertz wave parametric amplifier based on four-wave mixing in asynchronously pumped graphene oxide integrated TOPAS " *Optics Express* **29**,NO. 21,(2021): 33053-3306.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تحلیل پایداری دو لیزر جفت شده متقابل نیمه رسانا در حضور جاذب‌های اشباع پذیر به روش معادله مشخصه

مبهوتی ، خسرو ؛ نادرعلی ، رحیم ؛ عباس زاده، عرفان

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه ارومیه، ارومیه

چکیده

در این مقاله، تحول زمانی دو لیزر نیمه رسانا که به صورت متقابل به یکدیگر جفت شده‌اند در حضور دو جاذب اشباع پذیر مورد مطالعه قرار گرفته است. این بررسی به صورت تحلیلی و همچنین عددی انجام گرفته است. حل تحلیلی معادلات نرخ این سیستم به کمک استخراج معادله مشخصه درجه سوم با استفاده از ماتریس ژاکوبین صورت گرفته است. معادلات نرخ تحول زمانی دامنه، وارونی انبوهی و جذب توسط معادلات نرخ یامادا نشان داده می‌شود. نتایج نشان می‌دهد که حضور ترکیب جاذب اشباع پذیر و لیزر دوم که به صورت مستقیم به جاذب اشباع پذیر و لیزر اول جفت شده است می‌تواند به عنوان یک تقویت کننده و پایدارساز در عملکرد لیزر نقش داشته باشد. با انطباق نتایج حاصل از ریشه های منتج از حل تحلیلی معادله مشخصه و مقادیر عددی بدست آمده از حل عددی مستقیم معادلات نرخ لیزری برای این سیستم به وضوح می‌توان گفت که ترکیب دو لیزر در حضور دو جاذب اشباع پذیر عملکرد پایدار و مطلوبی را در خروجی لیزر خواهد داشت.

واژه های کلیدی: *جاذب اشباع پذیر، لیزرهای نیمه رسانا ، تحلیل پایداری، معادله مشخصه، ژاکوبین*

Stability analysis of mutually coupled two semiconductor lasers subject to saturable absorber

Mabhouti, Khosro; Naderali, Rahim; Abbaszadeh, Erfan

Department of Physics, Factuality of Sciences, Urmia University, Urmia

Abstract

In this paper, the time evolution of two semiconductor lasers that are mutually coupled to each other in the presence of two saturable absorbers is studied. This study has been done analytically and also numerically. Analytical solution of rate equations of this system has been done by extracting the third degree characteristic equation using Jacobin matrix. Rate equations of time evolution for amplitude, population inversion, and absorption are shown by Yamada rate equations. The results show that the presence of a combination of saturable absorber and the second laser, which is directly coupled to the saturable absorber and the first laser, can play a role as an amplifier and stabilizer in laser performance. By matching the results obtained from the roots resulting from the analytical solution of the characteristic equation and the numerical values obtained from the numerical solution of the laser rate equations for this system, it can be said that the combination of two lasers in the presence of two saturable absorbers will have stable and desirable performance in lasers output.

***Keywords**: Saturable Absorber, Semiconductor Lasers, Stability Analysis, Characteristic Equation, Jacobian*

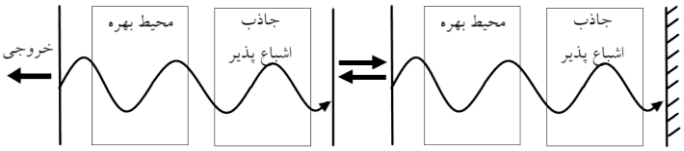
PACS No. ۳۰

۱ مقدمه

جاذب‌های اشباع پذیر بر روی یک بستر خاص با مواد نوری نیمه رسانا ساخته می شوند. جاذب اشباع پذیر نوعی قطعه اپتیکی غیرخطی می باشد که بسته به شدت پرتو ورودی، مقادیر جذب متفاوتی خواهد داشت[۱و۲]. این قطعات اپتیکی برای عملکرد جذب و اشباع، به شدت‌های بالا نیاز دارد. این امر در حضور باریکه‌های لیزری تأمین خواهد شد. لیزرهای نیمه‌رسانا برای عملکرد قفل مدی که عمدتاً در صنعت مخابرات مورد استفاده قرار می‌گیرد، به دو روش فعال و غیر فعال می‌توانند دینامیک مورد نظر را تأمین نمایند[۳]. استفاده از جاذب‌های اشباع پذیر در دسته روش‌های غیرفعال جای می‌گیرد. دستیابی به عملکرد مطلوب به منظور تامین نیازهای صنایعی همچون مخابرات نوری در حضور

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

لیزری گردد. ویژگی این ترکیب دست یافتن به خروجی پالسی پایدار برای یک لیزر نیمه رسانا خواهد بود. به بیان دیگر این مهم با رویکردی مبتنی بر بهینه‌سازی هندسه دستگاه و طراحی کاواک، شامل انتخاب و تنظیم دقیق جاذب اشباع پذیر درون کاواک خارجی و بازتاب‌پذیری متناسب وجوه بازتابنده صورت می‌پذیرد به نحوی که پالسهایی کوتاه‌تر و پایدارتر با دامنه‌ای تقویت شده داشته باشیم. با آن می‌تواند منجر به تولید پالس‌های کوتاه‌تر و افزایش پایداری توالی پالسها گردد [۴و۵]. در این مقاله، ابتدا عملکرد زمانی جاذب اشباع پذیر را مستقلاً مورد بررسی قرار میدهیم سپس با وارد کردن شدت خروجی لیزر به ترکیب اولیه، تاثیر حضور جاذب اشباع پذیر را در معرض پرتو یک لیزر منفرد مورد بررسی قرار خواهیم داد. در نهایت، عملکرد ساختار مبتنی بر دو لیزر جفت شده متقابل (شکل۱)، در حضور دو جاذب اشباع پذیر مطالعه خواهد شد. در تمامی این مراحل از دو منظر حل تحلیلی و عددی، رفتار دینامیکی سیستم، حد آستانه پایداری و معادله مشخصه مولفه‌هایی هستند که مورد بررسی قرار خواهد گرفت.



شکل۱: طرحواره دو لیزر جفت شده متقابل در حضور دو جاذب اشباع‌پذیر

۲ معرفی معادلات نرخ لیزر

معادلات یامادا که معرف تغییرات زمانی پارامتر های دامنه میدان، وارونی انبوهی و جذب می‌باشند را به صورت زیر معرفی می‌کنیم[۶]:

$$\dot{F}_i = (G_i - Q_i - 1)F_i + \sigma_i + K(F_{i+1} + F_{i-1} - 2F_i) \qquad (۱)$$

$$\dot{G}_i = \gamma_i(A_i - G_i - I_i G_i) \qquad (۲)$$

$$\dot{Q}_i = \gamma_i(B_i - Q_i - a_i I_i Q_i) \qquad (۳)$$

که F دامنه، G بهره، Q جذب، I شدت لیزری، A_i جریان بایاس بهره، B_i جذب پس زمینه، a_i دیفرانسیل جذب نسبت به دیفرانسیل بهره، γ نرخ واپاشی جذب و بهره، σ فاکتور نویز گاوسی است[۷]. در این مقاله از پارامتر نویز صرف نظر می‌شود $(\sigma = 0)$. مقادیر پارامترهای به کار رفته و محدوده مجاز آنها نیز در جدول (۱) نشان داده شده است.

پارامتر	نام	محدوده مجاز
A_i	جریان بایاس بهره	$A_i \geq 0$
B_i	جذب پس زمینه (بهره)	$B_i \geq 0$
a_i	دیفرانسیل جذب نسبت به دیفرانسیل بهره	$a_i \geq 1$
γ_i	نرخ واپاشی جذب و بهره	$0 \leq \gamma_i \prec 0/05$

۳ محاسبات عددی

۳-۱ حل تحلیلی

نخست با توجه به معادلات (۱و۲و۳) با پیش فرض $(K=0)$ و $(i=1)$برای لیزر منفرد، ماتریس ژاکوبین محاسبه گردد:

$$J = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(G-Q-1) & \frac{F}{2} & -\frac{F}{2} \\ 0 & -\gamma(1+I)-\lambda & 0 \\ 0 & 0 & -\gamma(1+aI)-\lambda \end{pmatrix}$$

(۴)

دترمینان ماتریس را برابر صفر قرار میدهیم تا مشخصه سیستم منفرد را استخراج کنیم:

$$\lambda^3 + \lambda^2\left[-\frac{1}{2}(G-Q-1)+\gamma(2+I+aI)\right]$$
$$+\lambda\left[-\frac{\gamma}{2}(G-Q-1)(2+I+aI)+\gamma^2(1+aI)(1+I)\right]$$
$$+\left[-\frac{\gamma^2}{2}(G-Q-1)(1+aI)(1+I)\right]=0$$

(۵)

سپس با توجه به معادلات نرخ (۱و۲و۳) و با پیش فرض $(K \neq 0)$ و $(i=1)$ و $(i=2)$ برای دو لیزر جفت شده متقابل(شکل۱)، ماتریس ژاکوبین را به صورت زیر مینویسیم:

$$J = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(G_1-Q_1-1)-K-\lambda & \frac{K}{2} & \frac{F_1}{2} & 0 & -\frac{F_1}{2} & 0 \\ \frac{K}{2} & \frac{1}{2}(G_2-Q_2-1)-K-\lambda & 0 & \frac{F_2}{2} & 0 & -\frac{F_2}{2} \\ 0 & 0 & -\gamma_1(1+I_1)-\lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\gamma_2(1+I_2)-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\gamma_1(1+a_1I_1)-\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\gamma_2(1+a_2I_2)-\lambda \end{pmatrix}$$

(۶)

به صورت مشابه با ماتریس لیزر منفرد، معادله مشخصه را برای دو لیزر جفت شده متقابل، بدست می‌آوریم:

$$\lambda^3 + \lambda^2\left[\gamma(p+q)-\frac{1}{2}(x+y)+2K\right]$$
$$+\lambda\left[\gamma(-\frac{1}{2}(x+y)+2K)(p+q)+(\frac{3}{4}K^2-\frac{1}{2}K(x+y)+\frac{1}{4}xy)\right]$$
$$+\left[\gamma(\frac{3}{4}K^2-\frac{1}{2}K(x+y)+\frac{1}{4}xy)(p+q)\right]=0$$

(۷)

پارامترهای(x، y، p و q) در معادله مشخصه بالا عبارتند از:

$x=(G_1-Q_1-1)$; $y=(G_2-Q_2-1)$; $q=(2+I_1(1+a))$; $p=(2+I_2(1+a))$

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

جدول۳ : ریشه‌های بدست آمده از معادلات مشخصه (۵) و (۷).

عنوان	ریشه ها
معادله مشخصه (۵)	$\lambda_1 = 0/0045$
	$\lambda_2 = -0/2025 + 0/0405i$
	$\lambda_3 = -0/2025 - 0/0405i$
معادله مشخصه (۷)	$\lambda_1 = -0/0549$
	$\lambda_2 = 0/1449$
	$\lambda_3 = -1/3576 + 0/00002i$
	$\lambda_4 = -1/3576 - 0/00002i$
	$\lambda_5 = -0/7719 + 0/00002i$
	$\lambda_6 = -0/7719 - 0/00002i$

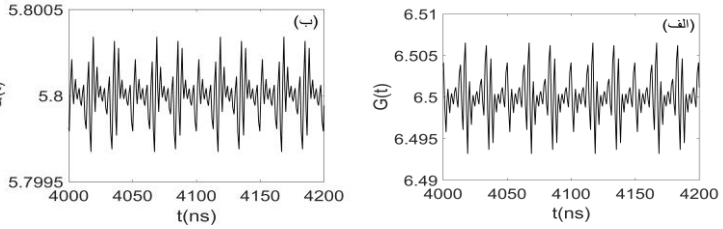
مطابق جدول (۲) ریشه‌های معادلات مشخصه (۵) و (۷) را بررسی میکنیم.

*اگر ریشه صرفاً حقیقی باشد، دو حالت ممکن پیش می‌آید. اگر مقداری مثبت باشد، دینامیک سیستم ناپایدار است و اگر مقداری منفی باشد، سیستم از نظر دینامیکی پایدار است. اما در هیچ کدام از این دو حالت سیستم دینامیک نوسانی ندارد.

*اگر ریشه مختلط باشد، که با توجه به فرم کلی اعداد مختلط ($R \pm Ii$) شامل دو قسمت حقیقی و موهومی می‌باشد، قسمت موهومی معرف نوسان و چرخه حدی در دینامیک سیستم است. اگر بخش موهومی، منفی باشد، باز هم با دو حالت روبه رو هستیم. ممکن است بخش حقیقی منفی باشد که در این صورت دینامیک سیستم را نوسانی پایدار معرفی میکنیم. همچنین ممکن است بخش حقیقی مقداری مثبت داشته باشد که در این حالت نیز با دینامیک نوسانی ناپایدار رو به رو هستیم. در نتیجه ریشه مطلوب باید به فرم ($-R - Ii$) باشد. لذا برای معادله مشخصه (۵)، λ_3، و برای معادله مشخصه (۷)، λ_4 و λ_6 مطلوب خواهد بود. به ازای ریشه‌های مطلوب، مقادیر پارامترهای A، B، a و γ به ترتیب ۷/۴ و ۵/۸ و ۱/۸ و ۰/۰۴ بدست می‌آیند که شکلهای (۳) و (۴) براساس آنها رسم می شود.

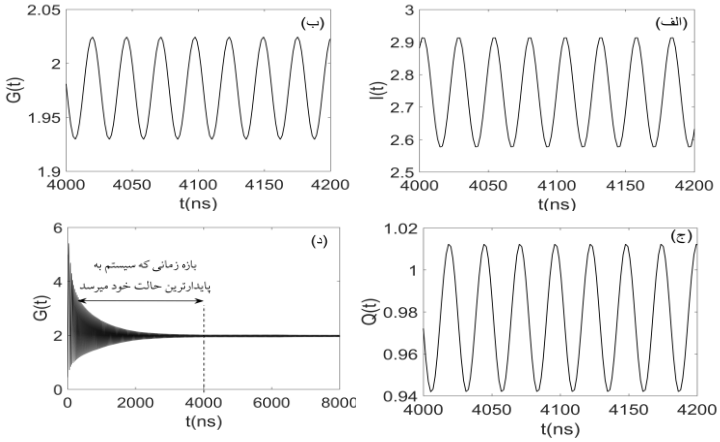
۲-۳ حل عددی

در این بخش معادلات نرخ را به صورت عددی به کمک الگوریتم رانگ-کوتا و نرم افزار متلب مورد بررسی و حل قرار میدهیم[۸].



شکل۲: تحول زمانی جذب و بهره در عدم حضور شدت لیزری I برای مقادیر عددی: γ=0/04; A=5/6; B=5/8; a=1/8

عدم وجود شدت لیزر ($I = 0$)، با توجه به نمودار تحول زمانی جذب و بهره (شکل ۲) می‌توان مشاهده کرد که جاذب اشباع پذیر به صورت پریودیک در بازه‌های زمانی ۵۰ نانوثانیه تکرار می‌شود. براساس این نمودار ضریب جذب جاذب اشباع پذیر در بازه [۵/۸ تا ۵/۷۹] مشاهده می‌شود و بیشینه میزان جذب ۵/۸ می‌باشد. بیشینه میزان بهره نیز برابر با ۶/۵ (با واحد اختیاری) بدست می‌آید. همانطور که مشاهده میشود نمودار تحول زمانی به صورت پریودیک بوده و این امر نشاندهنده آن است که این است که سیستم دائماً در حال جذب و اشباع می‌باشد. سپس با حل عددی معادلات نرخ برای حالت ($I \neq 0$)، در حضور باریکه لیزری، میتوان نمودار تحول زمانی شدت خروجی، ضریب جذب و بهره را به صورت شکل (۳) نشان داد.

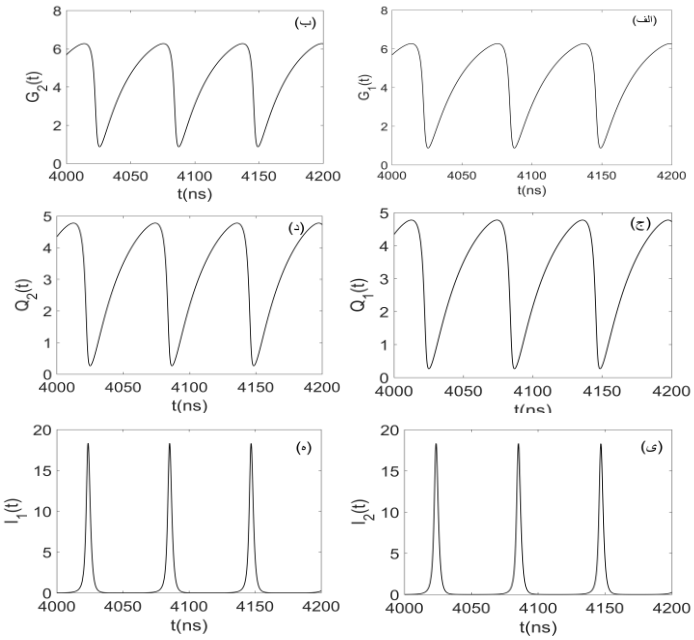


شکل۳: نمودار تحول زمانی شدت خروجی، ضریب جذب و بهره برای لیزر منفرد در حضور شدت لیزری برای مقادیر γ=0/04; A=5/6; B=5/8; a=1/8

همانطور که از شکل (۳) مشاهده می‌شود، پهنای زمانی لیزر در حالت ($I \neq 0$) نسبت به حالت ($I = 0$)، به حدود ۲۵ نانوثانیه کاهش یافت. که نشاندهنده افزایش پهنای فرکانسی لیزری است. بر اساس مقدار بیشینه نشان داده شده در شکل (۳-الف) شدت خروجی در حدود ۲/۹ (واحد اختیاری) خواهد بود. با توجه به شکل میتوان گفت که عملکرد لیزر در شرایط مطلوب پریودیک و پایداری قرار گرفته است. در واقع برای حل عددی این ساختار، باتوجه به نتایج بدست آمده معادله مشخصه (۵) در بخش (۱-۳) عمل میکنیم. ریشه های بدست آمده از این معادله مشخصه، مقادیر مطلوب (جدول۲) را برای عملکرد پایدار ارائه می‌دهد. بطوریکه دامنه نوسانات جذب، بهره و شدت لیزری پایدار میباشد. از نقطه نظر دینامیکی زمانیکه براساس اعداد داده شده لیزر شروع به تحول زمانی میکند در چرخه‌ای وارد خواهد شد که به عنوان چرخه حدی شناخته میشود[۹]. چرخه‌حدی نشاندهنده رفتارهای نوسانی در هر سیستمی می‌باشد. اینکه در چرخه حدی، سیستم به سمت نوساناتی با فرآیند منجر به افزایش دامنه، کاهش دامنه، یا با دامنه

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

ثابت‌های پیشران وابسته به مقادیر عددی خواهد بود که با تغییر این پارامترها زمان‌های تناوبی بین پالسها افزایش می‌یابد. که هرچه شدت بیشتری به تحلیلی معادله مشخصه مربوطه (جدول ۲) منتج خواهد شد. در واقع استخراج ضرایب عددی بدست آمده از معادله مشخصه (۵) متضمن این موضوع خواهد بود که لیزر بعد از شروع به کارکرد، زمانی که در معرض جاذب اشباع پذیر قرار میگیرد، به سمت دینامیک‌های ناپایدار و غیر پریودیک پیش نخواهد رفت بلکه آنچنان رفتار می‌کند که به صورت پالسهای کاملا متراکم و پریودیک، تحول زمانی خواهد داشت. درنهایت سیستم را با دو جفت لیزر متقابل در حضور دو جاذب اشباع پذیر در نظر میگیریم.



شکل۴: تحول زمانی جذب و بهره و شدت لیزری بر حسب زمان در دو لیزر جفت شده متقابل با مقادیر γ=0/04; A=5/6; B=5/8; a=1/8

با انتخاب اعداد متناسب از معادله مشخصه (۷)، میبینیم که ترکیب دو لیزر به سمت چرخه حدی میل خواهد کرد که نهایتاً رفتاری کاملاً پریودیک با سطح دامنه بیشینه ثابت، خواهد داشت. به لطف حضور دو لیزر جفت شده، شاهد بازه‌های زمانی پایدار با قطارهای پالسی تقویت شده هستیم. در شکل (۳) با امواج پیوسته سروکار داریم ولی در شکل (۴) به علت حضور دو جفت لیزر، با دینامیک پالسی و قطارهای پالسی تقویت شده مواجه می‌شویم. همچنین مشاهده می‌شود در مقایسه با شکل (۲)، خروجی شکل (۴) در شرایط مطلوبی از جذب و بهره قرار می‌گیرد. نکته قابل توجه این است که از لحاظ زمانی، پالسهایی به مراتب تفکیک پذیرتر در خروجی خواهیم داشت. به بیان دیگر آنچه که در شکل (۳-الف) دیده می‌شود، در مقایسه با شکل (۴-ه) از دو منظر تفاوت دارد. نخست، شدت لیزری به خوبی تقویت می‌شود و دوم اینکه، با توجه به شکل (۴-ه و ۴-ی) به علت تزریق اپتیکی همانطور که انتظار میرود پهنای زمانی شدت کوتاه‌تر و به علت تقویت شدت، جاذب اشباع پذیر ارائه شود، مابین پالسهای خروجی، بازه‌ای به عنوان بازه استراحت تا تکرار پالس بعدی در حدود ۶۱ نانوثانیه به وجود می‌آید. با در نظر گرفتن بازه زمانی(در محدوده نانوثانیه) این موضوع به صورت امکان فوق‌العاده‌ای خواهد بود تا در فرآیند مدولاسیون و ارسال و دریافت اطلاعات، به خوبی امکان مدوله کردن و بارگذاری اطلاعات بر روی پالسها امکان پذیر گردد و این موضوع از نقطه نظر کاربردی به شدت قابل توجه می‌باشد.

۴ نتیجه گیری

به عنوان نتیجه گیری براساس مطالعات، مشاهده شد که جاذب اشباع پذیر با وجود اینکه به خودی خود پریودیک است اما خروجی پالسی منظم ندارد (مطابق شکل۲). اما زمانی که در معرض باریکه لیزری قرار می‌گیرد می‌تواند موج پیوسته و البته پایدار و منظمی ارائه دهد. اما اختلاف زمانی مابین پالسها مطلوب نیست (شکل ۳-ج). لذا لازم است ساختار با حضور لیزر و جاذب اشباع پذیر دوم دیگری مجدداً به صورت جفت شده متقابل اصلاح شود. جفت شدن متقابل این دو لیزر امکان بهره بردن از نتایج تزریق اپتیکی را به همراه خواهد داشت. تزریق اپتیکی به عنوان عاملی برای افزایش پهنای فرکانسی و تغییر دینامیک همواره در ساختارهای لیزری مطرح بوده است[۱۰]. سپس میتوان مشاهده کرد که پالسهایی تقویت شده‌تر با پهنای فرکانسی بالاتر(پهنای زمانی کوتاه‌تر) و قابلیت تفکیک پذیری متناسب‌تر مابین دو پالس در مقیاس زمانی خواهیم داشت این ترکیب پیشنهاد ویژه‌ای برای سیستم های مبتنی بر مخابرات نوری خواهد بود.

مرجع‌ها

[۱] Lee, Jinho, et al. "A 3-D printed saturable absorber for femtosecond mode-locking of a fiber laser." *Optical Materials* 89 (2019): 382-389.
[۲] Yariv, Amnon, and Pochi Yeh. Photonics: *optical electronics in modern communications*. Oxford university press, 2007.
[3] Rulliere, Claude. Femtosecond laser pulses. New York: Springer Science+ Business Media, Incorporated, 2005.
[4] Meinecke, Stefan, et al. "Ultra-short pulse generation in a three section tapered passively mode-locked quantum-dot semiconductor laser." Scientific Reports 9.1 (2019): 1-۱۴.
[5] Lau, K. Y., et al. "Long-term stability and sustainability evaluation for mode-locked fiber laser with graphene/PMMA saturable absorbers." Optics Communications 435 (2019): 251-۲۵۴.
[6] Dubbeldam, Johan LA, and Bernd Krauskopf. "Self-pulsations of lasers with saturable absorber: dynamics and bifurcations." Optics communications 159.4-6 (1999): 325-338.
[7] Perego, A. M., and M. Lamperti. "Collective excitability, synchronization, and array-enhanced coherence resonance in a population of lasers with a saturable absorber." Physical Review A ۹۴.۳ (۲۰۱۶): ۰۳۳۸۳۹.
[8] Tocino, A., and Ramón Ardanuy. "Runge–Kutta methods for numerical solution of stochastic differential equations." Journal of Computational and Applied Mathematics 138.2 (2002): 219-۲۴۱.
[9] Strogatz, Steven H. Nonlinear dynamics and chaos: with applications to physics, biology, chemistry, and engineering. CRC press, 2018.
[10] Ohtsubo, Junji. Semiconductor lasers: stability, instability and chaos. Springer, 2012.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 منتشر شده است.

شبیه سازی حسگر فراماده در ناحیه فروسرخ با هندسه دایروی: نقش پارامترهای ساختاری

دیلمی شبانکاره، حانیه[1] ؛ پاکارزاده، حسن [1]؛فرخی، زهرا[1] ؛

[1] دانشکده فیزیک ، دانشگاه صنعتی شیراز ، شیراز

چکیده

در این مقاله، به بررسی تاثیر هندسه، مواد و پارامترهای هندسی نظیر ضخامت، شعاع داخلی و خارجی ها، شعاع دیسک و عرض شکاف بین دیسک وحلقه به منظور افزایش حساسیت حسگرفرامواد پرداخته می‌شود. در طراحی نانوساختارفرامواد، از یک لایه آینه فلزی، یک لایه بافر(که یک ماده دی الکتریک است)، یک تشدید کننده حلقه و دیسک و برخی مواد مایع نوری غیرخطی تشکیل شده است. نانوساختار پیشنهادی می‌تواند به عنوان پایه حسگر زیستی در تشخیص تغییرات ضریب شکست محیط برای مواد زیستی مختلف و مایعات نوری غیرخطی استفاده شود و نتایج نشان می‌دهد که هندسه و پارامترهای هندسی حسگر که در مقاله آورده شده است، بهینه هستند.

واژه های کلیدی: *حسگرزیستی،فرامواد، پارامترهای هندسی، حساسیت، فروسرخ*

Simulation of metamaterial sensor in infrared region with circular geometry: the role of structural parameters

Deylami Shabankare, Hanie[1]; Pakarzadeh, Hassan[1]; Farrokhi, Zahra[1];

[1] *Department of physics, Shiraz University of Technology, Shiraz*

Abstract

In this paper, the effect of geometry, materials and geometric parameters such as thickness, internal and external radius, disk radius and the width of the gap between the disk and the loop to increase the sensitivity of the material sensor is investigated. In the design of nanostructures, the material consists of a metal mirror layer, a buffer layer (which is a dielectric material), a ring and disk resonator, and some nonlinear optical liquid materials. The proposed nanostructure can be used as a basis for biosensors in detecting changes in the refractive index of the environment for various biomaterials and nonlinear optical fluids, and the results show that the geometry and geometric parameters of the sensor given in the paper are optimal.

***Keywords**: BioSensor, Metamaterials, Geometric parameters, Sensitive, Infrared.*

PACS No. 42

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مقدمه

ناحیه تراهرتز عمدتا شامل بازه بسامدی ۱۰ –۰/۱ ترا‌هرتز است و یک تراهرتز معادل $۱۰^{۱۲}$ هرتزاست[۱].

تابش فروسرخ بخشی از طیف الکترومغناطیس است که ساختار چشم انسان قادر به تشخیص یا دیدن آن نیست. هر جسمی که دمای آن بالاتر از صفر مطلق باشد، تابش فروسرخ ایجاد می‌کند که دارای محدوده‌ی فرکانسی ۳×۱۰^{۱۱} – ۴×۱۰^{۱۴} هرتز است[۲].

برای حسگر از تعاریف و اصطلاحات مختلفی استفاده می‌شود که بستگی به زمینه کاربرد دارد. به‌طورکلی حسگر، دستگاهی است که نوعی ورودی از محیط فیزیکی را تشخیص داده و به آن واکنش نشان می‌دهد[۳].

فرامواد، مواد مصنوعی معمولا تشدیدی با سلول‌های واحد کوچک‌تر ازطول‌موج تابش الکترومغناطیسی و دارای خصوصیاتی بی‌نظیر به نسبت مواد طبیعی هستند[۹-۶]. آن‌هامی‌توانند‌دربازه‌های‌بسامدی‌مختلفی از ماکروویو تا فروسرخ برای کارکردهای متنوعی استفاده‌میشود[۷-٤].

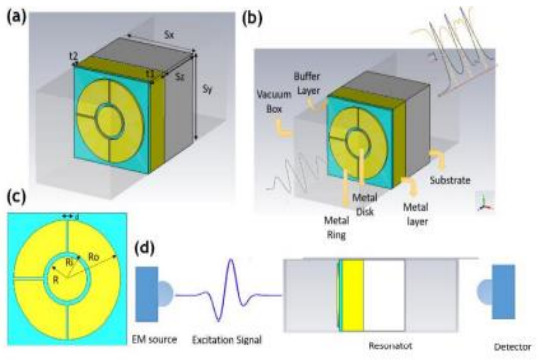
لاری و همکاران یک نانوحسگر فراماده برای ناحیه فروسرخ طراحی کردند که درآن مقاله تاثیر ابعاد پارامتر هندسی و هندسه به صورت دقیق بر حساسیت بررسی نشده است ولیکن در این مقاله ، موارد گفته شده را بررسی می‌کنیم[۸].

در بخش اول این مقاله چگونگی طراحی حسگر و مشخصات هندسی آن بیان شده، سپس در بخش دوم تاثیر هندسه، پارامترهای هندسی و جنس فلز مورد استفاده را بررسی می‌کنیم و در بخش سوم به نتیجه گیری کلی و هدف از بیان وطرح این مسئله پرداخته شده است.

طراحی حسگر و مشخصات هندسی آن:

شکل ۱ سلول واحد ساختار طراحی شده را نشان می دهد که حسگر طراحی شده حساسیت نسبتا بالایی دارد. حساسیت یک حسگر به صورت تغییر در بسامد تشدیدی (طول موج) به ازای یک واحد تغییر در ضریب شکست محیط‌دربرگیرنده تعریف می‌شود. میزان حساسیت حسگر برابر با ۲۷۳nm/RIU دارد که معادل با 53 THz/RIUاست[۸].

در ساختار نانو پیشنهادی، یک لایه شیشه با ضخامت ٤۰۰ نانومتر وجود دارد. همچنین از یک لایه آینه فلزی با ضخامت ۳۰ نانومتر استفاده شده است.



شکل ۱ساختار هندسی سلول واحد نانوساختار پیشنهادی در (الف، ب) سه بعدی، و (ج، د) دو بعدی. پارامترهای هندسی عبارتند از :

$S_X = S_Y =$ ۶۰۰ نانومتر، $S_Z =$ ۴۰۰ نانومتر، $t_1 =$ ۲۰۰ نانومتر، $t_2 =$ ۳۰ نانومتر، R=۱۰۰ نانومتر، $R_i =$ ۱۲۰ نانومتر، $R_o =$ ۲۷۰ نانومتر و d=۱۰ نانومتر. امواج فرودی در جهت Z منتشر می شوند[۸].

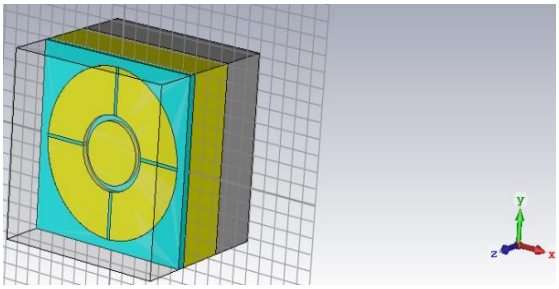
لایه بافر یک فیلم نازک از فلوراید منیزیم (MgF_2) با ضخامت ۳۰ نانومتر است. ثابت دی الکتریک $MgF_۲$ و بستر شیشه‌ای به ترتیب ۱/۸۷ و ۲/٤۰۲۵ است. یک دیسک و حلقه فلزی با ضخامت ۲۰ نانومتر در بالای لایه بافر قرار می‌گیرد. از مدل Drude برای فلزات استفاده می‌شود که در آن پلاسما (wp)و فرکانس برخورد (Υ)به ترتیب 13.8×10^{15} (s-1) و 0.11×10^{15}(s-1) می‌باشد (در شبیه سازی اول از طلا استفاده شده است) فرمول درود به شرح زیر است[۸].

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$$\varepsilon(\omega)=1-\omega_P^2/\omega(\omega+i\gamma)$$

بررسی‌تاثیر هندسه و جنس برحساسیت

در این بخش میخواهیم تاثیر هندسه و جنس ساختار بر حساسیت حسگر را بررسی کنیم. مطابق شکل ۲ یک شکاف به ساختار حسگر اضافه شده و تمام بررسی‌های لازم نیز روی ساختار جدید انجام شده‌است.



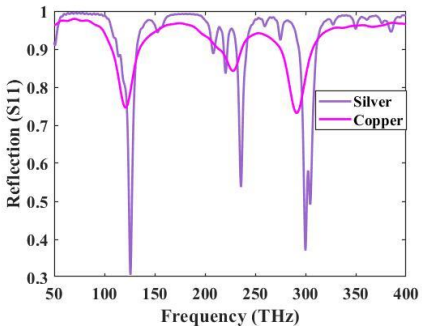
شکل۲ ساختار جدید طراحی شده.

برای دستیابی به میزان حساسیت بیشتر از مقدار گزارش شده در مقاله، باز جدول ۱ برای تغییر جنس ساختار حسگر استفاده شده است.

جدول۱: پلاسما و فرکانس های برخورد فلز مختلف مورد استفاده[۸].

Metals	Plasma frequency ($\omega_p \times 10^{15}$ S^{-1})	Collision frequency ($\nu_c \times 10^{15}$ S^{-1})
Silver	14	0.032
Gold	13.8	0.11
Copper	13.4	0.14
Aluminum	22.9	0.92

اما بیشترین میزان حساسیت مربوط به شکل ۳ در محدوده‌ی فرکانسی ۱۰۰ تا ۱۵۰ تراهرتز است که در ساختار حسگر نیز از فلز نقره و مس استفاده شده است که برابر با ۱۱۹/۰٤ nm/RIU است که از مقدار حساسیت به ذکر شده در مقاله کمتر است و فرکانس تشدید فلز نقره و مس برابربا ۱۲۰ THz و ۱۲٦ THz بوده است.

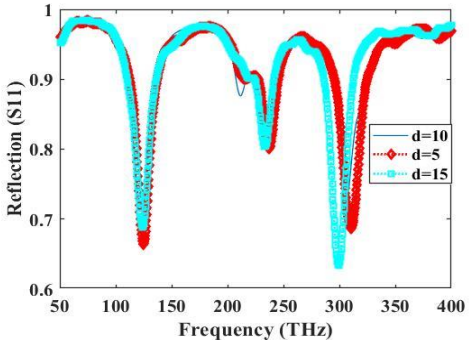


شکل۳: نمودار بازتاب برحسب فرکانس ساختار جدید حسگر .

بررسی پارامترهای هندسی بر حساسیت

در این بخش میخواهیم تاثیر پارامترهای هندسی بر حساسیت حسگر را برای نمودار بازتاب بررسی کنیم.

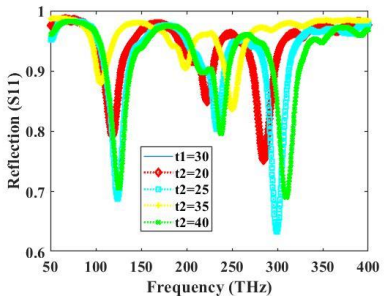
اگر فاصله شکاف‌ها (d) را تغییر دهیم، محدوده فرکانسی دره و قله‌های تشدید فقط به اندازه ۱۰ تراهرتز تغییرمی‌کند و بیشترین محدوده‌ی دره تشدید مرتبط با انعکاس در d=۳۱۰THz است. با این تفاسیر میزان بهینه برای فاصله‌ی شکاف همان مقدار بیان شده در مقاله می‌باشد (d = ۱۰nm). شکل٤ تاثیر پارامترd را نشان می‌دهد.



شکل٤: طیف بازتابی حسگرزیستی به ازای مقادیرمختلف فاصله شکاف.

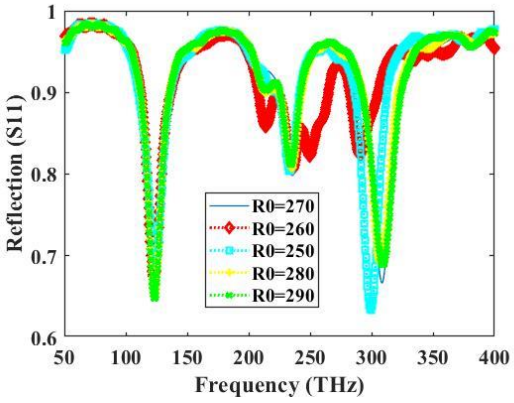
وقتی ضخامت لایه بافر(t_2) را تغییر می‌دهیم، بیشترین مقدار تغییر دره و قله‌های نمودارمربوط به t_2 = ۳۰nm و t_2 = ۴۰nm است که همان طور که در شکل مشخص است این دو نمودار برهم منطبق شدند (نمودارهای آبی تیره و سبز) و مقدار بهینه برای این پارامتر برابربا t_2 = ۳۰nm است. شکل۵ تاثیر پارامتر t_2 را نشان می‌دهد.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل۵: طیف بازتابی حسگرزیستی به ازای مقادیرمختلف ضخامت لایه بافر.

اگر شعاع حلقه فلزی (R_0) را تغییر دهیم بیشترین مقدار تغییر دره و قله‌های نمودار مربوط بهR_0= ۲۷۰nm می‌باشد که همان مقدار بیان شده در مقاله می‌باشد. شکل٦ تاثیر پارامتر R_0 را نشان می‌دهد.



شکل٦: طیف بازتابی جسگر زیستی به ازای مقادیر مختلف شعاع حلقه فلزی.

نتیجه‌گیری

در این مقاله تاثیر هندسه، جنس فلزات مثل مس، نقره و ابعاد پارامترهای هندسی از قبیل: فاصله شکاف‌ها، ضخامت لایه بافر و شعاع حلقه فلزی را بر حساسیت حسگرمعرفی شده بررسی کردیم.

با بررسی نمودارهای به دست آمده متوجه شدیم مقادیر بیان شده در مقاله در حالت بهینه بوده و بیشترین میزان برای حساسیت حسگر، هندسه سه شکافی بوده است (شکل۱).

به عبارت دیگر بررسی تغییر هندسه، ابعاد پارامترهای هندسی و جنس فلزها در میزان حساسیت تاثیری نداشته و بیشترین میزان حساسیت ۲۷۳ nm/RIU بوده که در مقاله بیان شده است. و حسگر بررسی شده به صورت حسگر زیستی در تشخیص تغییرات ضریب شکست محیط برای مواد زیستی مختلف و مایعات نوری غیرخطی استفاده می‌شود.

مرجع‌ها

[1] Wilmink, J. Gerald and J. E. Grundt; “Invited review article: current state of research on biological effects of terahertz radiation”; Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves

32, No. 10 (2011): 1074-1122.

[2] H.N.E. Jafarzadeh, S. Salamaat, Z. Rezvani and M. Behrouz; “Determination of Near Infrared Radiation (IR-A) at work unit in one of the Iran steel industries”, Iran. J. Public Health,No. 2, (2009)170-177.

[3] A.S. Kulkarni, D.C. Joshi and G.P. Tagalpallewar; “Biosensors for food and dairy industry”, Asian Journal of Dairy and Food Research,No. 33, (2014).292-296

[4] J.B. Pendry, D. Schurig, and D.R Smith; “Controlling electromagnetic fields”; *science* 312, No. 5781 (2006) 1780-

1782.

[5] J. Valentine, S. Zhang, T. Zentgraf, E. Ulin-Avila, D. A. Genov, G.Bartal and X.Zhang; “Three-dimensional optical metamaterial with a negative refractive index” ; nature 455, No.

7211 (2008) 376-379

[6] M. Askari, A. Zakery and A. S. Jahromi; “A low loss semi H-shaped negative refractive index metamaterial at 4.725 THz”; Photonics and Nanostructures-Fundamentals and Applications

No. 30 (2018) 78-83

[7] M. Askari, N. Niakan and A. Zakery; “A high transmission and low loss metamaterial with negative refraction at 458 THz”; Optik No.124, (2013) 2210-2213

[8] E.S. Lari, Z. Vafapour and H.Ghahraloud, “Optically tunable triple-band perfect absorber for nonlinear optical liquids sensing”; IEEE Sensors Journal, No. 20 (2020),.10130-10137.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

محاسبه اثر مگنتواپتیکی کِر عرضی با استفاده از روش ماتریس پراکندگی برای انتشار امواج الکترومغناطیسی در یک ساختار تک‌چرخشی مغناطیسی

امان‌اللهی، منصوره ؛ زمانی، مهدی

دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان

چکیده

در این مقاله فرمولبندی نظری برای محاسبه توزیع میدان در ساختارهای چندلایه تک‌چرخشی مغناطیسی و همچنین خواص بازتابی آن‌ها ارائه شده است. کاربرد این رویکرد با محاسبه تغییرات نسبی در دامنه‌های بازتاب و محاسبه اثر مگنتواپتیکی کِر عرضی برای امواج پلاریزه s که به ساختاری با ناهمسانگردی نوری برخورد می‌کنند، نشان داده شده است.

واژه‌های کلیدی: *روش ماتریس پراکندگی، محیط تک‌چرخشی مغناطیسی، اثر مگنتواپتیکی کِر عرضی*

Calculation of the transverse magneto-optical Kerr effect using the scattering matrix approach for propagation of electromagnetic waves through gyromagnetic structures

Amanollahi, Mansoureh; Zamani, Mehdi

Faculty of Physics, Shahid Bahonar University of Kerman, Kerman

Abstract

In this paper, a theoretical formulation for calculating the field distribution in gyromagnetic multilayer structures as well as their reflectance properties is presented. The application of this approach is demonstrated by calculating the relative changes in the reflection amplitudes and transverse magneto-optical Kerr effect for s-polarized waves that strike a structure with optical anisotropy.

***Keywords**: Scattering matrix approach, Gyromagnetic medium, Transverse magneto-optics Kerr effect*

PACS No. 42,75

مقدمه

در سال ۱۸۴۵، مایکل فارادی کشف کرد که قطبش یک موج الکترومغناطیسی قطبیده خطی در اثر انتشار در یک ماده تحت تأثیر میدان مغناطیسی خارجی موازی با جهت انتشار نور، می‌چرخد [۱]. امروزه این پدیده که نتیجه ناهمسانگردی نوری القا شده در ماده توسط یک میدان مغناطیسی خارجی یا مغناطش ذاتی است و اثر مگنتواپتیکی کِر برای امواج منعکس شده، برای تعیین تجربی خواص نوری یک ماده استفاده می‌شود [۲]. به عنوان مثال، اثر مگنتواپتیکی کِر، شامل تغییر قطبش و/یا شدت نور انعکاسی به هنگام عبور نور از یک محیط مغناطیسی است. بسته به جهت نسبی بین بردار انتشار موج فرودی و مغناطش یا میدان مغناطیسی اعمال شده، انواع مختلفی از اثر مگنتواپتیکی کِر وجود دارد. برای مثال، هنگامی که بردار انتشار دارای یک مؤلفه در امتداد بردار مغناطیسی است، یک موج قطبیده s می‌تواند تا حدی به صورت یک موج قطبیده p منعکس شود و بالعکس. این تبدیل قطبش زمانی اتفاق می‌افتد که مغناطش عمود (اثر کِر قطبی) یا موازی (اثر کِر طولی) با سطح ماده مغناطیسی و موازی با صفحه تابش باشد. در مقابل، اگر بردار موج الکترومغناطیسی فرودی عمود بر مغناطش (یا میدان مغناطیسی خارجی) باشد، به جای تبدیل قطبش، یک تغییر نسبی

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

در دامنه نور منعکس شده زمانی که مغناطش / جهت میدان اعمالی، m، معکوس شود، خواهیم داشت. بسته به ناهمسانگردی نوری محیط، این تغییر نسبی که به عنوان اثر مگنتواپتیکی کِر عرضی شناخته می‌شود، با رابطه $(TMOKE)_\sigma=\frac{R_{\sigma\sigma}(+m)-R_{\sigma\sigma}(-m)}{R_{\sigma\sigma}(+m)+R_{\sigma\sigma}(-m)}$ تعریف می‌شود که در آن $R_{\sigma\sigma}$ احتمال انعکاس برای یک موج قطبیده- σ ($\sigma = s, p$) است [۳]. در این مقاله، ما یک رویکرد نظری را در چارچوب معادلات ماکسول الکترودینامیک کلاسیک و روش ماتریس پراکندگی، برای تجزیه‌وتحلیل انتشار امواج الکترومغناطیسی به ویژه در ساختارهای چند لایه تک‌چرخشی مغناطیسی ارائه داده‌ایم [٤-٥].

محاسبات و نتایج

ابتدا یک سیستم ناهمسانگرد چندلایه‌ای که خواص نوری آن توسط تانسورهای گذردهی الکتریکی $\hat{\varepsilon}$ و تراوایی مغناطیسی $\hat{\mu}$

$$\hat{\varepsilon}=\begin{pmatrix}\varepsilon_{xx}&\varepsilon_{xy}&\varepsilon_{xz}\\ \varepsilon_{yx}&\varepsilon_{yy}&\varepsilon_{yz}\\ \varepsilon_{zx}&\varepsilon_{zy}&\varepsilon_{zz}\end{pmatrix},\qquad \hat{\mu}=\begin{pmatrix}\mu_{xx}&\mu_{xy}&\mu_{xz}\\ \mu_{yx}&\mu_{yy}&\mu_{yz}\\ \mu_{zx}&\mu_{zy}&\mu_{zz}\end{pmatrix}$$

توصیف می‌شود، در نظر گرفته شده. هدف، توصیف انتشار امواج الکترومغناطیس در این ساختار است. بنابراین، باید با حل معادلات ماکسول

$$\nabla.\mathbf{D}=0, \quad (۱)$$
$$\nabla.\mathbf{B}=0, \quad (۲)$$
$$\nabla\times\mathbf{E}=-\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t}, \quad (۳)$$
$$\nabla\times\mathbf{H}=\frac{\partial\mathbf{D}}{\partial t} \quad (٤)$$

شروع کرد، که D جابه‌جایی الکتریکی و B القای مغناطیسی به ترتیب از طریق روابط

$$\mathbf{D}=\varepsilon_0\hat{\varepsilon}\mathbf{E}, \quad (٥)$$
$$\mathbf{B}=\mu_0\hat{\mu}\mathbf{H} \quad (٦)$$

به میدان‌های الکتریکی E و مغناطیسی H مربوط می‌شوند. برای حل معادلات ماکسول، روشی که در منبع [٦] پیش گرفته شده را دنبال کرده، و یک وابستگی زمانی هارمونیک $e^{-i\omega t}$ برای میدان‌ها در نظر گرفته که تبدیلاتی به صورت $\omega\mu_0\mathbf{H}\to\mathbf{H}$ و $\omega/c\to\omega$ دارد. بنابراین معادلات (۳) و (٤) به شکل

$$\nabla\times\mathbf{E}=i\hat{\mu}\mathbf{H} \quad (۷)$$
$$\nabla\times\mathbf{H}=-i\omega^2\hat{\varepsilon}\mathbf{E} \quad (۸)$$

در می‌آیند. با در نظر گرفتن میدان‌ها به صورت

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},z)=e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}}e^{iqz}\left[e_x\hat{\mathbf{x}}+e_y\hat{\mathbf{y}}+e_z\hat{\mathbf{z}}\right]=e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}}e^{iqz}\mathbf{e}, \quad (۹)$$
$$\mathbf{H}(\mathbf{r},z)=e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}}e^{iqz}\left[h_x\hat{\mathbf{x}}+h_y\hat{\mathbf{y}}+h_z\hat{\mathbf{z}}\right]=e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}}e^{iqz}\mathbf{h}, \quad (۱۰)$$

که $\mathbf{k}=(k_x,k_y)$ بردار موج موازی با مرز است، معادلات ماکسول (۷) و (۸) به ترتیب به شکل ماتریسی

$$C^T\mathbf{e}=\hat{\mu}\mathbf{h}, \quad (۱۱)$$
$$C\mathbf{h}=\omega^2\hat{\varepsilon}\mathbf{e} \quad (۱۲)$$

در می‌آیند، که با استفاده از این معادلات، معادله ویژه‌مقداری

$$\left(C\hat{\gamma}C^T-\omega^2\hat{\varepsilon}\right)\mathbf{e}=0 \quad (۱۳)$$

برای میدان الکتریکی به دست می‌آید. ماتریس‌های C و $\hat{\gamma}$ هم به شکل

$$C\equiv\begin{pmatrix}0&q&-k_y\\ -q&0&k_x\\ k_y&-k_x&0\end{pmatrix} \quad (۱٤)$$
$$\hat{\gamma}\equiv\hat{\mu}^{-1} \quad (۱٥)$$

تعریف می‌شوند. معادلات (۲)، (٦) و (۱۰) منجر به عبارت

$$e_z=-\frac{(k_x\varepsilon_{xx}+k_y\varepsilon_{yx}+q\varepsilon_{zx})}{k_x\varepsilon_{xz}+k_y\varepsilon_{yz}+q\varepsilon_{zz}}e_x-\frac{(k_x\varepsilon_{xy}+k_y\varepsilon_{yy}+q\varepsilon_{zy})}{k_x\varepsilon_{xz}+k_y\varepsilon_{yz}+q\varepsilon_{zz}}e_y \quad (۱٦)$$

برای مؤلفه z میدان الکتریکی می‌شوند. ترکیب این رابطه و رابطه‌ی (۱۲)، منجر به معادله غیرخطی ویژه‌برداری

$$\left(\mathbf{B}_2q^2+\mathbf{B}_1q+\mathbf{B}_0+\mathbf{B}_{-1}\frac{1}{q}\right)\begin{pmatrix}e_x\\ e_y\end{pmatrix}=0 \quad (۱۷)$$

می‌شود. ماتریس‌های $(\mathbf{B}_i)_{2\times2}$ به صورت

$$\mathbf{B}_2=\varepsilon_{zz}\tilde{\mathbf{B}}_2, \quad (۱۸)$$
$$\mathbf{B}_1=\varepsilon_{zz}(\mathbf{B}_1^{(a)}+\mathbf{B}_1^{(b)})+\mathbf{B}_1^{(c)}\mathbf{B}_1^{(d)}+(\varepsilon_{xz}k_x+\varepsilon_{yz}k_y)\tilde{\mathbf{B}}_2,$$
$$\mathbf{B}_0=(\varepsilon_{xz}k_x+\varepsilon_{yz}k_y)(\mathbf{B}_1^{(a)}+\mathbf{B}_1^{(b)})+\mathbf{B}_1^{(c)}(k_x\mathbf{B}_0^{(a)}+k_y\mathbf{B}_0^{(b)})+(k_y\gamma_{zx}-k_x\gamma_{zy})\mathbf{B}_0^{(c)}\mathbf{B}_1^{(d)}+\gamma_{zz}\varepsilon_{zz}\mathbf{B}_0^{(d)}+\omega^2\mathbf{B}_0^{(e)},$$
$$\mathbf{B}_{-1}=(k_y\gamma_{zx}k_x\gamma_{zy})\mathbf{B}_0^{(c)}(k_x\mathbf{B}_0^{(a)}+k_y\mathbf{B}_0^{(b)})+\gamma_{zz}(k_x\varepsilon_{xz}+k_y\varepsilon_{yz})\mathbf{B}_0^{(d)}\omega^2\mathbf{B}_0^{(c)}(\varepsilon_{xz}\mathbf{B}_0^{(b)}-\varepsilon_{yz}\mathbf{B}_0^{(a)})$$

تعریف می‌شوند، که در آن‌ها ماتریس‌هایی به شکل

$$\tilde{\mathbf{B}}_2=\begin{pmatrix}\gamma_{yy}&-\gamma_{yx}\\ -\gamma_{xy}&\gamma_{xx}\end{pmatrix},$$
$$\mathbf{B}_0^{(a)}=\begin{pmatrix}\varepsilon_{xx}&0\\ 0&\varepsilon_{xy}\end{pmatrix},$$
$$\mathbf{B}_1^{(a)}=\begin{pmatrix}-k_y\gamma_{zy}&k_y\gamma_{zx}\\ k_x\gamma_{zy}&-k_x\gamma_{zx}\end{pmatrix},$$

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$$\mathbf{B}_0^{(b)} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{yx} & 0 \\ 0 & \varepsilon_{yy} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{B}_1^{(b)} = \begin{pmatrix} -k_y\gamma_{yz} & k_x\gamma_{zx} \\ k_y\gamma_{xz} & -k_x\gamma_{xz} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{B}_0^{(c)} = \begin{pmatrix} k_y & k_y \\ -k_x & -k_x \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{B}_1^{(c)} = \begin{pmatrix} -k_y\gamma_{yx} & -k_y\gamma_{yx} \\ k_y\gamma_{xx} & k_y\gamma_{xx} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} k_x\gamma_{yy} & k_x\gamma_{yy} \\ -k_x\gamma_{xy} & -k_x\gamma_{xy} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{B}_0^{(d)} = \begin{pmatrix} {k_y}^2 & -k_xk_y \\ -k_xk_y & {k_x}^2 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{B}_0^{(e)} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xz}\varepsilon_{zx} & \varepsilon_{xz}\varepsilon_{zy} \\ \varepsilon_{yz}\varepsilon_{zx} & \varepsilon_{yz}\varepsilon_{zy} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx}\varepsilon_{zz} & \varepsilon_{xy}\varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{yx}\varepsilon_{zz} & \varepsilon_{yy}\varepsilon_{zz} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{B}_1^{(d)} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{zx} & 0 \\ 0 & \varepsilon_{zy} \end{pmatrix} \qquad (۱۹)$$

تعریف می‌شـــوند. حل معادله ویژه‌مقداری (۱۷) برای قطعه‌ای که تراوایی آن با تانسور (۲۰) توصیف می‌شود، آغاز می‌شود. فرض شده که گذردهی ε اسکالر و مختلط است. در این حالت $\hat{\mu}$ و $\hat{\gamma}$ به صورت

$$\hat{\mu} = \begin{pmatrix} \mu & 0 & i\beta m \\ 0 & \mu & 0 \\ -i\beta m & 0 & \mu \end{pmatrix}, \qquad (۲۰)$$

$$\hat{\gamma} = (\mu^2 + \mu_{xz}^2)^{-1} \begin{pmatrix} \mu & 0 & -\mu_{xz} \\ 0 & (\mu^2 + \mu_{xz}^2)/\mu & 0 \\ \mu_{xz} & 0 & \mu \end{pmatrix} \qquad (۲۱)$$

تعریف می‌شـــود. معادله ویژه‌مقادیری (۱۷) قطری می‌شـــود و مؤلفه‌های آن به شکل

$$\mathbf{B}_2 = \varepsilon \begin{pmatrix} \gamma_{yy} & 0 \\ 0 & \gamma_{xx} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B}_1 = 0, \qquad (۲۲)$$

$$\mathbf{B}_0 = \varepsilon \begin{pmatrix} \delta_{yy}k_x^2 - \varepsilon\omega^2 & 0 \\ 0 & \gamma_{xx}k_x^2 - \varepsilon\omega^2 \end{pmatrix}, \ \mathbf{B}_{-1} = 0$$

در می‌آیند. با حل معادله، دو گروه ویژه‌مقدار تبهگن

$$q_1^2 = \frac{\varepsilon\omega^2}{\gamma_{yy}} - k_x^2, \qquad q_2^2 = \frac{\varepsilon\omega^2}{\gamma_{xx}} - k_x^2 \qquad (۲۳)$$

به دســـت می‌آیند، که ویژه‌بردار مرتبط با آن‌ها به ترتیب $(1,0)^T$ و $(0,1)^T$ اســـت. توجه شـــود که p_n=-q_n دلالت بر $\boldsymbol{\phi}_{\pm} = \hat{1}_{2\times2}$ دارد. بنـابرایـن، $f_{slab}^{+}(d) = f_{slab}^{-}(d) = \mathrm{diag}\{e^{iq_1z}, e^{iq_2z}\}$ ماتریس لایه برای این قطعه به شکل

$$\hat{M}_{slab} = \begin{pmatrix} \varepsilon\omega^2/q_1 & 0 & -\varepsilon\omega^2/q_1 & 0 \\ 0 & \gamma_{xx}q_2 - k_x\gamma_{xz} & 0 & -\gamma_{xx}q_2 - k_x\gamma_{xz} \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad (۲۴)$$

در می‌آید [۷]. به سادگی می‌توان مشاهده کرد که ماتریس لایه برای محیط اطراف با تراوایی μ_0 به صورت

$$\hat{M}_0 = \begin{pmatrix} \omega^2/q_0 & 0 & -\omega^2/q_0 & 0 \\ 0 & \mu_0 q_0 & 0 & -\mu_0 q_0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad (۲۵)$$

اســـت، که $q_0^2=\mu_0\omega^2-k_x^2$. ســـپس ماتریس‌های مرزی قطعه که در مرجع [۷] به صورت کامل تعریف شدند، به شکل

$$\hat{I}(0,1) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon q_0 + q_1}{q_1} & 0 & \frac{-\varepsilon q_0 + q_1}{q_1} & 0 \\ 0 & \frac{\gamma_0 q_0 + \gamma_{xx} q_2 - k_x\gamma_{xz}}{\eta_0 q_0} & 0 & \frac{\gamma_0 q_0 - \gamma_{xx} q_2 - k_x\lambda_{xz}}{\gamma_0 q_0} \\ \frac{-\varepsilon q_0 + q_1}{q_1} & 0 & \frac{\varepsilon q_0 + q_1}{q_1} & 0 \\ 0 & \frac{\gamma_0 q_0 - \gamma_{xx} q_2 + k_x\gamma_{xz}}{\gamma_0 q_0} & 0 & \frac{\gamma_0 q_0 + \gamma_{xx} q_2 + k_x\gamma_{xz}}{\gamma_0 q_0} \end{pmatrix} \qquad (۲۶)$$

$$\hat{I}(1,0) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon q_0 + q_1}{\varepsilon q_0} & 0 & \frac{\varepsilon q_0 - q_1}{\varepsilon q_0} & 0 \\ 0 & \frac{\gamma_0 q_0 + \gamma_{xx} q_2 + k_x\gamma_{xz}}{\gamma_{xx} q_1} & 0 & \frac{-\gamma_0 q_0 - \gamma_{xx} q_2 + k_x\gamma_{xz}}{\gamma_{xx} q_1} \\ \frac{\varepsilon q_0 - q_1}{\varepsilon q_0} & 0 & \frac{\varepsilon q_0 + q_1}{\varepsilon q_0} & 0 \\ 0 & \frac{-\gamma_0 q_0 + \gamma_{xx} q_2 - k_x\gamma_{xz}}{\gamma_{xx} q_1} & 0 & \frac{\gamma_0 q_0 + \gamma_{xx} q_2 - k_x\gamma_{xz}}{\gamma_{xx} q_1} \end{pmatrix} \qquad (۲۷)$$

در خواهند آمد. باید توجه داشت که قطعه با $l=1$ مشخص شده و پوشش‌ها (لایه‌های اطراف) با $l=0$ و $l=2$ مشخص شده‌اند.

اکنون می‌توان ماتریس‌های پراکندگی $\hat{S}_{21}(0,2)$ را محاســـبه کرد [۷]. باید با محاســـبه ماتریس $\hat{S}(0,1)$ $(l' = l = 0)$ که فرآیند پراکندگی را در اولین مرز قطعه توصیف می‌کند، شـروع کرد. برای این کار باید از ماتریس مرزی (۲۶) کمک گرفت و در نظر داشـت که $\hat{S}(l,l) = \hat{1}$. وقتی مؤلفه‌های ماتریس $\hat{S}(0,1)$ مشـــخص شـــدند، باید مؤلفه‌های ماتریس $\hat{S}(0,2)$ را به دســـت آورد، که با توجه به عدم وجود تغییر قطبش در هندســـه عرضـــی، این مؤلفه‌ها قطری هستند. به عنوان مثال، مؤلفه‌های $\hat{S}(0,2)$ را می‌توان به شکل

$$(\hat{S}_{21}(0,2))_{11} = \frac{(q_1^2 - \varepsilon^2 q_0^2)\sin(q_1 d)}{(q_1^2 + \varepsilon^2 q_0^2)\sin(q_1 d) + 2i\varepsilon q_0 q_1 \cos(q_1 d)}, \qquad (۲۸)$$

$$(\hat{S}_{21}(0,2))_{22} = \frac{(\gamma_0 q_0 - \gamma_{xx} q_2 + \gamma_{xz} k_x)(\gamma_0 q_0 + \gamma_{xx} q_2 + \gamma_{xz} k_x)\sin(q_2 d)}{(\gamma_0^2 q_0^2 + \gamma_{xx}^2 q_2^2 - \gamma_{xz}^2 k_x^2)\sin(q_2 d) + 2i\gamma_0 q_0 \gamma_{xx} q_2 \cos(q_2 d)} \qquad (۲۹)$$

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

نوشت. همان‌طور که بعداً مشاهده خواهد شد، برای محاسبه ضریب بازتاب فقط به همین دو درایه ماتریس پراکندگی نیاز است. ماتریس لایه پوشش‌ها (لایه‌های بیرونی)، این اجازه را می‌دهد که ماتریس بازتاب به شکل

$$\hat{R}_0 = \begin{pmatrix} -\mathbf{b}_{0,2} & \frac{q_0^2}{\omega^2\mu_0}\mathbf{b}_{0,2} \\ \frac{\omega^2\mu_0}{q_0^2}\mathbf{b}_{0,1} & -\mathbf{b}_{0,1} \end{pmatrix} \qquad (۳۰)$$

نوشته شود [۷]. در این‌جا برای امواج قطبیده-E_x (قطبیده-E_y)، $\mathbf{a}_{0,1}=0$ و $\mathbf{a}_{0,2}=1$ ($\mathbf{a}_{0,1}=1$ و $\mathbf{a}_{0,2}=0$) در نظر گرفته شده است. دامنه برگشت (رو به عقب) $\mathbf{b}_0=(\mathbf{b}_{0,1},\mathbf{b}_{0,2})^T$ با در نظر گرفتن ماتریس پراکندگی در کل سیستم به صورت

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{b}_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{S}_{11}(0,2) & \hat{S}_{12}(0,2) \\ \hat{S}_{21}(0,2) & \hat{S}_{22}(0,2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_0 \\ \mathbf{b}_2 \end{pmatrix} \qquad (۳۱)$$

دست می‌آید. باید توجه داشت که هیچ موج ورودی از پوشش سمت راست قطعه، یعنی $\mathbf{b}_2=0$ وجود ندارد. بنابراین برای امواج قطبیده-E_x $\mathbf{b}_{0,i} = \left(\hat{S}_{21}(0,2)\right)_{i2}$ است، و برای امواج قطبیده-E_y $\mathbf{b}_{0,i} = \left(\hat{S}_{21}(0,2)\right)_{i1}$ می‌باشد، و در نهایت ماتریس بازتاب در پایه-xy برابر با

$$\hat{R}_0 = \mathrm{diag}\{-\left(\hat{S}_{21}(0,2)\right)_{22} - \left(\hat{S}_{21}(0,2)\right)_{11}\} \qquad (۳۲)$$

است. با تبدیل این ماتریس به پایه-sp توسط معادله

$$\hat{R}_0^{(sp)} = \hat{u}^{-1}\hat{R}_0\hat{u} \qquad (۳۳)$$

که

$$\hat{u} = \begin{pmatrix} -\sin\varphi & \cos\varphi \\ \cos\theta\cos\varphi & \cos\theta\sin\varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \end{pmatrix}$$

می‌باشد تعریف می‌شود که Θ و φ به ترتیب زاویه‌ی قطبی و سمتی در دستگاه مختصات کروی‌اند. بنابراین، دامنه بازتاب برای امواج قطبیده s برابر با

$$r_{ss} = [(\hat{R}_0)^{sp}]_{11} = \frac{i(\gamma_0 q_0 - \gamma_{xx}q_2 + \gamma_{xz}k_x)(\gamma_0 q_0 + \gamma_{xx}q_2 + \gamma_{xz}k_x)\sin(q_2 d)}{-i(\gamma_0{}^2 q_0{}^2 + \gamma_{xx}{}^2 q_2{}^2 - \gamma_{xz}{}^2 k_x{}^2)\sin(q_2 d) + 2\gamma_0 q_0 \gamma_{xx} q_2 \cos(q_2 d)} \qquad (۳۴)$$

است. با وارونه شدن جهت مغناطش یا میدان مغناطیسی m ، تغییر این دامنه بازتاب ناشی از جمله خطی γ_{xz} است. بنابراین، در ساختار متقارنی که در این کار بررسی می‌شود، اثر مگنتواپتیکی کِر عرضی برابر با

$$(TMOKE)_S = \frac{N_-}{N_+} \qquad (۳۵)$$

می‌باشد، که $N_\pm$ به شکل

$$N_\pm = |(\gamma_0 q_0 - \gamma_{xx}q_2 + \gamma_{xz}(+m)k_x)(\gamma_0 q_0 + \gamma_{xx}q_2 + \gamma_{xz}(+m)k_x)|^2 \pm |(\gamma_0 q_0 - \gamma_{xx}q_2 + \gamma_{xz}(-m)k_x)(\gamma_0 q_0 + \gamma_{xx}q_2 + \gamma_{xz}(-m)k_x)|^2 \qquad (۳۶)$$

تعریف می‌شود. باید توجه داشت که این مقدار در هندسه متقارن به ضخامت قطعه وابسته نیست. با وارد کردن روابط (۲۱) و (۲۳) و مقادیر $\varepsilon=\varepsilon'+i\varepsilon''$ ،$\mu=\mu'+i\mu''$ و $\mu_{xz}=i\beta m$ و $\gamma_0=1/\mu_0$ در معادله (۳۶)، می‌توان عبارتی برای اثر مگنتواپتیکی کِر عرضی برای یک قطعه در هندسه متقارن به دست آورد که به شکل

$$\begin{aligned} N_- = {} & 2\beta\mu_0[(\beta^4 + 2\beta^2(\mu'' - \mu')(\mu'' + \mu') \\ & + (\mu''^2 + \mu'^2)^2)\mu_0(\mu'\varepsilon'' + \mu''\varepsilon') \\ & - 2\mu'\mu''|\beta^2 - \mu^2|^2\cos^2\theta]\sin 2\theta, \\ N_+ = {} & |\beta^2 - \mu^2|^4\cos^4\theta + \mu_0|\beta^2 - \mu^2|^2\cos^2\theta \times \\ & [-2\mu''^3\varepsilon'' - 2\mu'\mu''^2\varepsilon'' + \mu'^2(\mu_0 - 2\varepsilon'\mu') - \beta^2(\mu_0 + \\ & 2\varepsilon''\mu'' - 2\varepsilon'\mu') - \mu''^2(\mu_0 - 2\varepsilon'\mu') + (\beta^2 + \mu''^2 - \\ & \mu'^2)\mu_0\cos 2\theta] - \frac{1}{8}[\beta^4 + 2\beta^2(\mu'' - \mu')(\mu'' + \mu') + \\ & (\mu''^2 + \mu'^2)^2] \times \mu_0{}^2[-4\beta^4 - 3\mu_0{}^2 + \mu_0(-8\varepsilon''\mu'' + \\ & 8\varepsilon'\mu') - 8(\varepsilon''^2 + \varepsilon'^2)(\mu''^2 + \mu'^2)4\mu_0(\mu_0 + 2\varepsilon''\mu'' - \\ & 2\varepsilon'\mu') \times \cos 2\theta + (4\beta^2 \quad - \mu_0{}^2)\cos 4\theta \end{aligned} \qquad (۳۷)$$

می‌باشد.

نتیجه‌گیری

در این کار یک رویکرد نظری، در چارچوب الکترودینامیک کلاسیک، برای تحلیل حالت‌های الکترومغناطیسی مجاز در ساختارهای چندلایه مسطح ارائه شده و به کمک آن اثر مگنتواپتیکی کِر عرضی با استفاده از روش ماتریس پراکندگی برای انتشار امواج الکترومغناطیسی در یک ساختار تک‌چرخشی مغناطیسی محاسبه شده است.

مرجع‌ها

[۱] M. Faraday, *Phil. Trans. Roy. Soc. Lond.* **1** (1846) 136.
[۲] J. Kerr, *Philos. Mag.* **3** (1877) 321.
[۳] A. Zvezdin and V. Kotov, *Modern Magnetooptics and Magnetooptical Materials*, IOP (1997).
[۴] P. Yeh, *Optical Waves in Layered Media*, John Wiley & Sons, New York (1988).
[۵] B. Pendry, *J. Mod. Opt.* **41** (1994) 209.
[۶] Wang SY, et al. *J. Appl. Phys.* **85** (1999) 5121.
[۷] M. Amanollahi et al. *Physica B: Physics of Condensed Matter* **615** (2021) 413067.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی اثرتخریبی باریکه الکترون توسط رودوترون بر پارامترI-V ترانزیستور و دیود

دارم، زهرا [۱]- شیرانی بیدآبادی، بابک[۱،*] -گلشاه، سعید[۲]

[۱] دانشگاه اصفهان، دانشکده فیزیک

[۲] وزارت ارتباطات و فناوری اطلاعات ، پژوهشگاه فضایی ایران ، پژوهشکده مواد و انرژی

چکیده

در این پژوهش به بررسی تجربی اثر پرتو الکترون بر قطعات پرداخته شده است. برای پرتودهی الکترون از شتاب‌دهنده رودوترون با انرژی ۱۰ MeV و دزهای kGy ۱۰ و ۲۰ kGy استفاده شد. در دمای ثابت رابطه I-V هر دیود و ترانزیستور اندازگیری شد. برای اعتبارسنجی نتایج، هر آزمایش سه مرتبه انجام شد. بررسی پارامترهای وابسته به آسیب پرتویی در مواد یکی از مهم‌ترین بخش‌های طراحی و مقاوم‌سازی مواد در محیط‌های پرتوی است. اطلاع از تغییرات ایجاد شده بر اثر پرتو می‌تواند موجب پیشرفت در طراحی سیستم‌های پرتوی و انتخاب مناسب مواد به کار رفته در ساختارهای تشکیل دهنده شود. نمونه ها قبل و بعد از تابش‌دهی توسط دستگاه اتولب در ولتاژهای مختلف آنالیز شدند. نتایج نشان داد جریان عبوری از ترانزیستور و دیود در اثر تابش الکترون کاهش می‌یابد. الکترون‌ها، ذرات بارداری هستند که به صورت پیوسته با ماده برهم‌کنش می‌کنند، ذرات باردار به محض ورود به ماده هدف برهم‌کنش کولنی با الکترون یا هسته انجام می‌دهند. الکترون باعث یونش درون نیمه هادی و در نهایت منجر به آسیب به نیمه هادی می‌گردد. از آنجا که الکترون باعث یونش اتم‌ها در ساختار کریستالی می‌شود این تخریب ساختار و اثر الکترون بر عملکرد قطعه دائمی می‌باشد.

واژه های کلیدی: باریکه الکترون، رودوترون ، ترانزیستور دو قطبی، ترانزیستور ماسفت، دیود، دز یونیزان کل

Investigation the effect of electron beam degradation by rodotron on the I-V Characteristics of Transistor and Diode

Daram, Zahra (1) - Shirani Bidabadi, Babak (1, *) - Golshah, Saeed (2)

1 University of Isfahan, Faculty of Physics

2 Ministry of Communications and Information Technology, Iran Space Research Institute, Materials and Energy Research Institute

Email: b.shirani@ast.ui.ac.ir

Abstract

In this research, the effect of electron beam on parts has been experimentally investigated. Rodotron accelerator with 10 MeV energy and doses of 10 kGy and 20 kGy were used for electron irradiation. At constant temperature, the I-V of each diode and transistor was measured. Investigation of parameters related to radiation damage in materials is one of the most important parts of material design and reinforcement in radiation environments. Awareness of changes caused by radiation can lead to improvements in the design of radiation systems and the proper selection of materials used in the constituent structures. The samples were analyzed at different voltages before and after irradiation by an autolab. The results showed that the current passing through the transistor and diode is reduced by electron radiation. Electrons are charged particles that interact continuously with matter; charged particles interact with the electron or nucleus as soon as they enter the target substance. Electrons cause ionization inside the semiconductor and eventually lead to damage to the semiconductor. Because the electron ions ionize the atoms in the crystal structure, this structure degradation and the effect of the electron on the performance of the part are permanent.

Keywords: Electron beam, rodotron, bipolar transistor, MOSFET transistor, diode, total ionization dose

مقدمه

تاثیرات تابش در زمینه‌های مختلفی از جمله صنعت نیمه رساناها و صنعت فضایی اهمیت بالایی داشته و مورد توجه قرار گرفته است . یکی از مهمترین آسیب‌های یونیزان که در

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

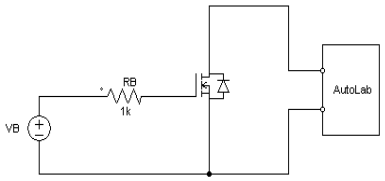
قطعات الکترونیکی ماهواره‌ها قابل ملاحظه می‌باشد، آسیب دزیونیزان کل است. افت تدریجی ناشی از دزیونیزان کل در قطعات میکروالکترونیک از تشکیل بار در لایه‌های عایق نتیجه می‌شود و دارای اثر تجمعی در قطعات الکترونیکی است که منجر به از دست رفتن تدریجی عملکرد و شکست احتمالی آن می‌شود ترانزیستورهای دو قطبی و ماسفت اجزای اصلی مدارهای مجتمع در تجهیزات تجاری ، فضایی، نظامی و سایر تجهیزات هستند (۳-۱). سیستم‌های الکترونیکی موجود در فضا و سایر محیط‌های تابشی در معرض تشعشعات مختلفی قرار دارد که ممکن است نیمه هادی را تحت تاثیر قرار دهند. قطعات الکترونیکی در محیط فضا در یک ماموریت در معرض دزهای کل ده‌ها کیلوگری تا ده‌ها مگا گری قرار دارند. با توجه به ابهامات موجود در مورد محیط تابش‌های فضایی و خطاهای موجود در ساخت قطعات، پاسخ این قطعات نسبت به تابش‌های مختلف هنوز به طور کامل شناخته شده نیست و نیاز به انجام آزمایش‌های بیشتر برروی تکنولوژی‌های submicron است (۷-۵). الکترون‌های تولید شده در فضا به مقدار کافی انرژی دارند که باعث یونش سایر اتم‌های ساختار شبکه شوند. در نتیجه یونش، برخی دام‌های سطحی دائمی در ساختار کریستال بوجود می‌آید.

تابش‌های یونیزه باعث کاهش در ویژگی‌های (I-V) ماسفت‌ها (I_{DS}-V_{GS}) می‌شوند(۱۰-۸). این کاهش از طریق ایجاد جفت الکترون- حفره در لایه اکسید ترانزیستورها ایجاد می‌شود(۱۱). حفره‌ها چون تحرک کمتری نسبت به الکترون‌های تولید شده در سطح $Si\text{-}sio_2$ دارند با احتمال بیشتر به دام می افتند. بار مثبت ایجاد شده، در جریان کانال ماسفت باعث شیفت ولتاژ آستانه می‌شود(۱۲).

تغییر در مشخصه‌های الکتریکی ترانزیستورهای BJT، توسط مکانیزم تحریک و انتقال الکترون از باند ظرفیت به باند رسانش انجام می‌شود. این امر موجب ایجاد تعداد زیادی اتم برانگیخته شده و همچنین تعداد حفره‌های ایجاد شده در باند ظرفیت را نیز افزایش می‌دهد که می‌تواند باعث تغییر در جریان کلکتور شود. در این پژوهش مشخصه I-V قبل و بعد از تابش اندازه گیری شده با استفاده از این مشخصه می توان ، تغییرات جریان و ولتاژ آستانه قبل و بعد از تابش در دوحالت مقایسه کرد. هدف از این آزمایش نشان دادن تغییرات ولتاژ و جریان قطعات بعد از تابش می باشد. با افزایش دز تابش، جریان قطعات آنقدر کاهش میابد که جریان به اشباع برسد و قطعات کارایی خود را از دست بدهد.

ابزار و روش‌ها

از دستگاه اتولب جهت اندازگیری مشخصه I-V ترانزیستورها و دیودها استفاده می‌شود. با استفاده از منبع تغذیه، ولتاژ مناسب بر اساس کاتالوگ ترانزیستورها به مدار اعمال می شود، سپس محدوده ولتاژ برای رسم منحنی I-V با استفاده از اتولب را تنظیم می‌کنیم. این دستگاه با اندازگیری ولتاژ و جریان بطور خودکار و همزمان، در مدت زمان کوتاهی منحنی I-V ترانزیستور یا دیود را رسم می‌کند. در این آزمایش قطعات در ولتاژهای مختلف تست شده است. قطعات حین تابش بایاس نبودند. ابتدا مشخصه I-V قطعات اندازگیری شد سپس مورد تابش قرار گرفت بعد از تابش، بایاس و اندازگیری شد. برای اندازگیری منحنی I-V قطعات با استفاده از اتولب، از یک مدار مطابق شکل۱ استفاده می‌شود.



شکل۱: مداربسته شده برای اندازگیری I-V ترانزیستور

از شتاب‌دهنده رودوترون برای تولید باریکه الکترونی استفاده می‌شود. در شتاب‌دهنده الکترونی، باریکه الکترون به وسیله یک تفنگ الکترونی تولید می‌شود و الکترون‌ها پس از گذر از میدان الکتریکی شتاب می‌گیرند تا به انرژی موردنظر برسند. سپس این باریکه روی هدف مورد نظر تابیده می‌شود. شتابدهنده رودوترون با حداکثر توان باریکه خروجی ۴۰ KW و حداکثر جریان خروجی ۸ mA از نوع RF موج پیوسته است. حداکثر انرژی باریکه الکترون ۱ MeV تا ۱۰ MeV با تلورانس ۲۵۰ keV ± است. افزایش انرژی با قدم های ۱ MeV می باشد.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

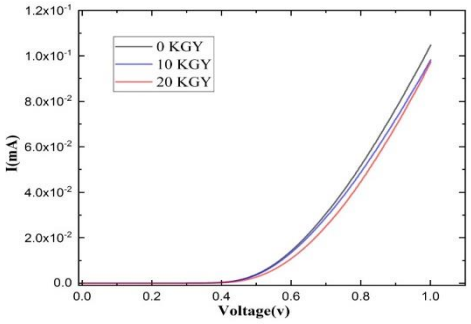
نتایج و بحث

دیودهای انتخاب شده ازدیودهای تجاری پر مصرف هستند. و در جدول ۱ مشخصات آن‌ها با هم مقایسه شده است.

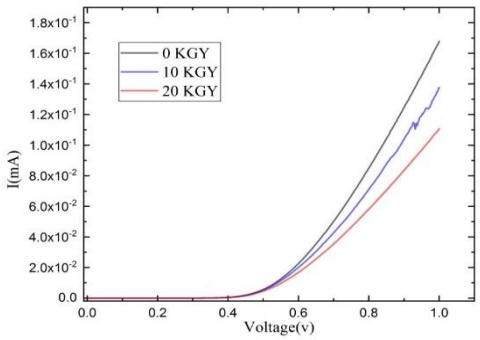
جدول(۱): مشخصات BY399،MUR460 و1N5399

نام دیود	تکنولوژی	ولتاژ روشن شدن	ولتاژ شکست	بیشینه جریان
MUR460	Ultra fast	۰/٤ V	٤۰۰ V	۴ A
BY399	Fast	۰/٦ V	٥٦۰ V	۳ A
1N5399	General Proposed	۰/۷ V	۲۰۰ V	۱/٥ A

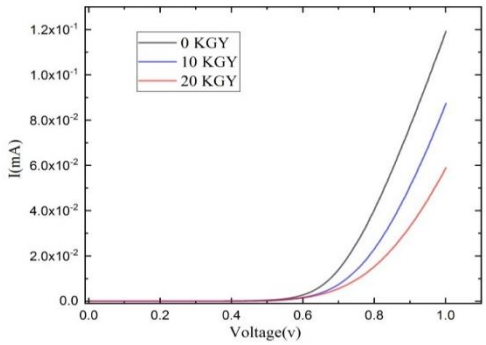
نمودار تغییرات مشخصه I-V دیودها در شکل ۲ مشاهده می‌شود. همانطور که مشاهده می‌شود دیود BY399 مقاومت خوبی نسبت به تابش الکترون داشته و منحنی I-V آن‌ها تغییرات اندکی دارد. دیود 1N5399 مقاومت کمتری در برابر تابش پروتون نسبت به دو نوع دیود دیگر داشت. با افزایش دز تابشی تخریب بیش‌تر شده، ولتاژ روشن شدن دیود افزایش یافته و مقدار جریان دیود در همان ولتاژ قبل از تابش کاهش می‌یابد و یا به عبارتی مقاومت روشنی دیود افزایش می‌یابد. مقدار درصد تخریب منحنی I-V در BY399 کمتر از MUR460 و کمتر از 1N5399 می‌باشد و لذا می‌توان نتیجه گرفت هر چه ولتاژ شکست بالاتر باشد برای تخریب باید دز بیشتری دریافت کند.



الف: BY399



ب: MUR460



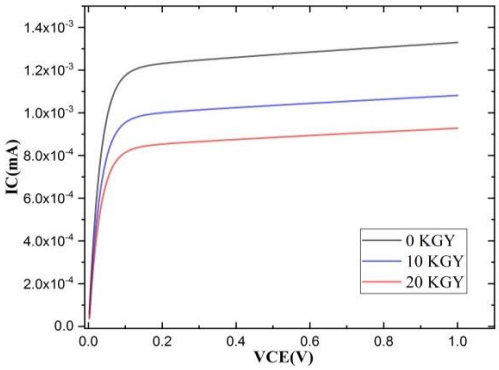
ج: 1N5399

شکل ۲ : تغییرات مشخصه I-V دیودها تحت پرتودهی الکترون از شتابدهنده رودوترون

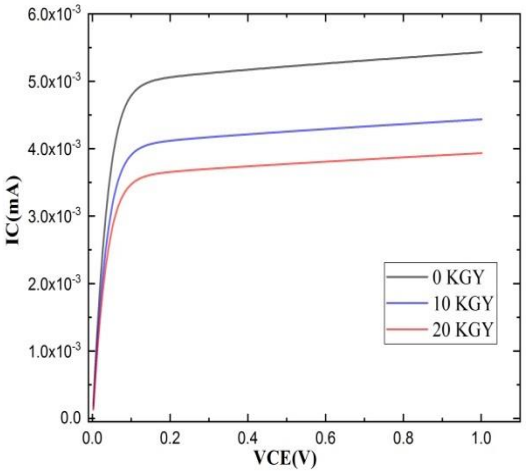
2N2222 یک ترانزیستور همه منظوره npn می‌باشد، که کاربرد زیادی در تقویت کنندگی سیگنال و سوییچینگ دارد. بیشینه جریان کلکتور این ترانزیستورmA ۸۰۰ و بیشینه ولتاژ کلکتور–امیتر آن ۳۰V می‌باشد. ترانزیستور2N2222 با دزهای ۱۰kGy و ۲۰kGy پرتودهی شد و تحت۲ ولتاژ مختلف مشخصه **I-V** آن اندازه‌گیری شد. ترانزیستور BC107 نیز یک ترانزیستور npn می‌باشد که بیشینه ولتاژ کلکتور امیتر آن۴۵ V و بیشینه جریان کلکتور آن نیز ۲۰۰ mA است و در تقویت سیگنال‌های صوتی کاربرد زیادی دارد. ترانزیستو IRF 740 یک ترانزیستور کاربردی در منابع تغذیه‌ی سوییچینگ می‌باشد که دارای بیشینه ولتاژ درین–سورس ۴۰۰ V و بیشینه جریان کلکتور ۱۰ A می‌باشد. ترانزیستور IRF 740 با تابش باریکه الکترون تابش‌دهی شد. منحنی تغییرات ترانزیستورها

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

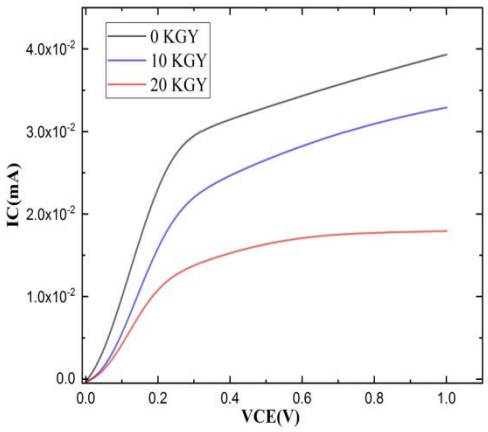
تحت ولتاژ ۲ V و ۱ V اندازه‌گیری شد که در شکل ۳ قابل مشاهده است.



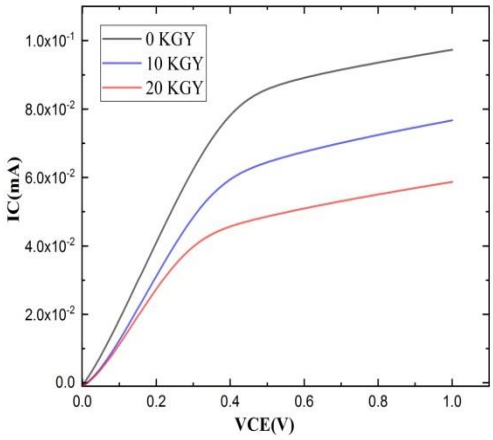
الف: 2N2222تحت ولتاژ V_{BE}=۱ v



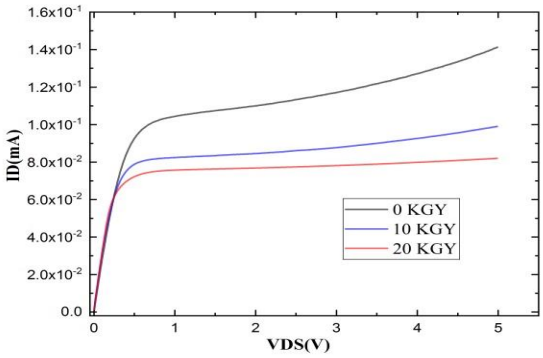
ب: 2N2222 تحت ولتاژ V_{BE}=۲ v



ج: BC107 تحت ولتاژ V_{BE}=۱ v

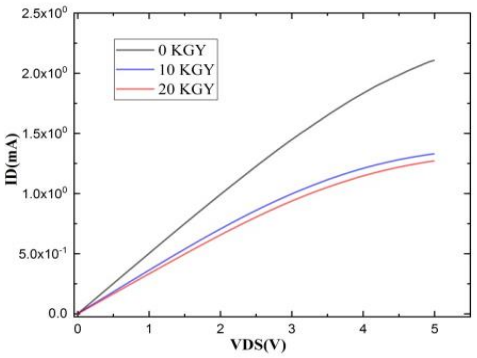


د: BC107 تحت ولتاژ V_{BE}=۲ v



ه: irf740 تحت ولتاژ V_{GS}= ۳ v

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



ی: irf740 تحت ولتاژ V_{GS}= ۴ v

شکل ۲ : تغییرات منحنی I-V ترانزیستورها تحت پرتودهی الکترون شتاب‌دهنده رودترون

نتیجه گیری

در این پژوهش به بررسی تجربی اثر الکترون بر قطعات پرداخته شده است. نتایج نشان داد که پرتودهی الکترون، بر پارامتر I-V قطعات الکترونیکی تاثیرگذار است. تابش‌دهی می‌تواند باعث افزایش دمای ماده‌ی درون ترانزیستور شود. با توجه به اینکه ماده-ی تشکیل دهنده‌ی ساختار درونی هر ترانزیستور، سیلیکون است، این ماده دارای ظرفیت گرمایی ویژه‌ی J/gr.K ۰/۷۰۳ می‌باشد، بنابراین برای تغییر دمای آن به اندازه‌ی یک درجه‌ی کلوین، مقدار ۷۰۳ Gy انرژی لازم است. پس تابش‌های بیشتر از kGy ۱ می-توانند بر روی آنها تأثیر چشمگیری داشته باشند.

از تحقیق انجام شده بر روی ترانزیستورها می‌توان دریافت که این ترانزیستورها بهترین گزینه برای کار در ناحیه‌ی فعال و استفاده در محیط‌های تابشی با دز کمتر از kGy ۱ می‌باشند، زیرا دارای مقاومت بالایی در مقابل افزایش دما بوده و از طرفی دزهای کم تر از kGy ۱ تأثیر چندانی بر روی مشخصه‌های الکتریکی آنها ندارند. پس می‌توان این ترانزیستورها را در طراحی مدارهای الکترونیکی و دستگاه‌های مورد استفاده در محیط‌های تابشی به کار برد.

این بررسی‌ها با هدف بومی‌سازی وتست قطعات مورد استفاده در ماهواره‌ها و تجهیزات ماموریت‌های فضایی در داخل کشور انجام شد تا این قطعات در داخل کشور از نظر مقاومت تابشی مورد آزمون قرار بگیرند.

مرجع‌ها

[1] Menichelli, M.; Alpata, B.; Battiston, R.; Bizzarri, M.; Blasko, S.; Massoa, L.; Fioria, E.M.; Papia, A.; Scalieri, G. Nuclear Physics B. **2002,** 113, 310–313..
[2] Barnaby, H.J.; Schrimpf, R.D.; Sternberg, A.L.; Berthe, V.; Cirba, C.R.; Pease R.L. IEEE Trans. Nucl. Sci **2001,** 48, 2074–2080.
[3] Pushpa, N.; Praveen, K.C.; Gnana Prakash, A.P.; Prabhakara Rao, Y.P.; Ambuj Tripati, G.; Revannasiddaiah, D. Nucl. Instr. Meth. Res. A. **2010,** 613, 280–289.
[4] Anjum, A.; Vinayakprasanna, N.H.; Pradeep, T.M.; Pushpa, N.; Krishna, J.B.M.; Gnana Prakash, A.P. Nucl. Instr. Meth. Res. B. **2016,** 379, 265–271.
[5] Fleetwood, Z.E.; Kenyon, E.W.; Lourenco, N.E.; Jain, S.; Zhang, E.X.; England, T.D.; Cressler, J.D.;
Schrimpf, R.D.; Fleetwood, D.M. *IEEE Trans. Device Mater. Rel.* **2014,** *14* (3), 844–848.
[6] Haran, A.; Murat, M.; Barak, J. *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **2008,** *55*, 2098–2105.
[7] Murat, M.; Akkerman, A.; Barak, J. *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **2006,** *53* (4), 1973–1980
[8] Ma TP, Dressendorfer PV. Ionizing radiation effects in MOS devices and circuits. New York: John Wiley & Sons; 1989.
[9] Soubra M, Cygler J, Maskay G. Evaluation of a dual bias metal oxide silicon semiconductor field effect transistors detector as radiation dosimeter. Med Phys 1994;21(1):567–72.
[10] Benedetto JM, Boesch HE, McLean FB. Dose energy dependence of interface trap formation in 60Co and X-ray environments. IEEE Trans Nucl Sci 1988;35 (6):1260–4.
[11] Oldham TR, McLean FB. Total ionizing dose effect in MOS oxides and devices. IEEE Trans Nucl Sci 2003;50(6):483–99.
[12] Freeman R, Holmes-Siedle A. A simple model for predicting radiation effects in MOS devices. IEEE Trans Nucl Sci 1978;25(6):1216–25.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بهینه‌سازی حفاظ نوترونی کامپوزیت پلی‌متیل متاکریلات وپلی‌اتیلن با استفاده از شبکه عصبی

یحیایی، عاطفه؛ رسولی، فاطمه‌سادات؛ مسعودی، سید فرهاد

گروه فیزیک هسته‌ای، دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران، ایران

چکیده

در پژوهش حاضر، حفاظ چشمه نوترون ^{241}Am-Be ناهمسانگرد، ساخته شده از پلی‌متیل متاکریلات، پلی‌اتیلن و اسیدبوریک با استفاده از کد MCNPX بر اساس یک مطالعه قبلی مورد بررسی قرار گرفته است. با تغییر چهار پارامتر شامل، درصد وزنی پلی‌اتلین، درصد وزنی اسیدبوریک به کار رفته در کامپوزیت، ضخامت لایه پلی‌اتیلن و ضخامت کامپوزیت در مجموع برای ۴۰۰ حالت مختلف حفاظ توسط کد MCNPX اجرا گردید و پارامترهای ذکر شده به‌عنوان ورودی و شار نوترون گرمایی به عنوان خروجی به شبکه عصبی جهت یادگیری ماشین داده شد. با توجه به اینکه برای حالت‌های مختلف مورد آزمون، نتایج بدست آمده از شبکه عصبی با نتایج واقعی هم‌خوانی داشت، نظر به گستردگی حالت‌های ممکن در بهینه‌سازی حفاظ و زمان‌بر بودن استفاده از روش مونت‌کارلو، شبکه عصبی برای پیش‌بینی مقادیر مربوط قابل اعتماد خواهد بود و با استفاده از شبکه عصبی، می‌توان از اجرای برنامه‌های متعدد مونت‌کارلو اجتناب کرد.

واژه‌های کلیدی: *حفاظ نوترونی، پلی‌متیل‌متاکریلات، شبکه عصبی، روش مونت‌کارلو*

Optimization of neutron shield of polymethyl methacrylate and polyethylene composite using neural network

Yahyaei, Atefeh; Rasouli, Fatemeh S. Masoudi, S. Farhad
Department of Physics, K. N. Toosi University of Technology, Tehran, Iran

Abstract

In the present study, the shield of neutron source ^{241}Am-Be, made of polymethyl methacrylate, polyethylene, and boric acid, was investigated using the MCNPX code based on a previous study. By changing four parameters including weight percentage of polyethylene, weight percentage of boric acid used in the composite, thickness of the polyethylene layer and thickness of the composite for a total of 400 different shielding properties were simulated by using the MCNPX code. The mentioned four parameters has been considered as input, and the thermal neutrons flux were given as output to the neural network for machine learning. Given that for the different modes tested, the results obtained from the neural network were in good agreement with the realistic data, and due to the wide range of possible modes in optimizing shields as well as the time-consuming the Monte Carlo simulations, the neural network will be a reliable method for predicting related values in shielding. Strictly speaking, by using neural networks, multiple Monte Carlo programs can be avoided.

Keywords: *Neutron Shield, Methyl methacrylate, Neural network, Monte Carlo method*
PACS NO. 89

مقدمه

حفاظت در برابر نوترون‌ها چالش بزرگی برای استفاده از چشمه‌های نوترونی در صنعت و پزشکی به‌شمار می‌رود. قرار گرفتن در معرض تابش نوترون می‌تواند صدمات جبران ناپذیری به اندام‌های حیاتی وارد کند. عوارض بیولوژیکی قرار گرفتن در معرض تابش نوترون به‌طور قابل‌توجهی بیشتر از مقدار معادل دوز

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تابش جذب شده از بتا، گاما و پرتو X است. بنابراین، استفاده صنعتی و پزشکی از آن، درجه بالاتری از حفاظت در برابر نوترون‌ها را به‌عنوان یک تابش خطرناک برای سلامتی انسان ضروری کرده است. کامپوزیت‌هایی که حاوی مواد با عدد اتمی بالا مانند باریم، سرب و بیسموت هستند، برای جذب پرتو گاما یا X استفاده می‌شوند، در حالی‌که مواد حاوی عناصری با عدد اتمی پائین مانند هیدروژن، لیتیوم، کربن، بور و آلومینیوم در جذب نوترون مناسب‌ترند. نوترون‌ها به‌دلیل اندرکنش با هسته‌ها، از نظر انرژی نوترون و عدد اتمی جاذب رفتار پیچیده‌ای برای سطح مقطع جذب از خود نشان می‌دهند. عناصر با عدد اتمی پائین با سطح مقطع پراکندگی بالا برای میرایی و حفاظ نوترون مناسب هستند. پلی‌اتیلن و پارافین اغلب به‌عنوان مواد اساسی برای حفاظ‌سازی چشمه‌های با اندازه کوچک استفاده می‌شوند [۱]. یک کندکننده با ضخامت مناسب به‌عنوان لایه اول، نوترون‌های سریع را تا محدوده گرمایی هدایت می‌کند و سپس یک لایه نازک از جاذب مناسب می‌تواند آن‌ها را تضعیف کند. علاوه بر این، از آن‌جا که بیشتر مواد جاذب نوترون‌ها پرتو گاما تولید می‌کنند، لایه‌ای از مواد جاذب پرتو گاما باید در خارج از سیستم استفاده شود.

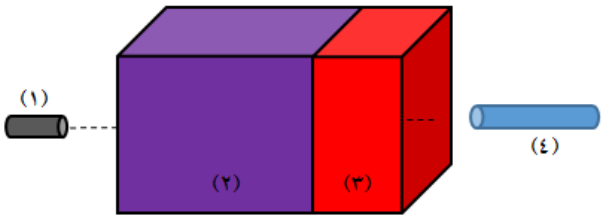
چشمه ^{241}Am-Be به‌دلیل انعطاف‌پذیری و قابل حمل بودن، یکی از چشمه‌هایی است که در بسیاری از آزمایشگاه‌ها، به‌ویژه به‌عنوان چشمه کالیبراسیون نوترون و گاما استفاده می‌شود. اگرچه این چشمه‌ها نوترون‌هایی را در محدوده وسیعی از انرژی با طیف غیریکنواخت تولید می‌کنند که منجر به مشکلاتی در طراحی حفاظ آن‌ها می‌شود، پیکربندی حفاظ بهینه می‌تواند این ضعف را جبران کرده و می‌توان آن‌ها را به طور کارآمد به کار برد [۲].

در پژوهش حاضر، حفاظ ساخته شده در مقاله شهرام و همکاران [۳] مبنای کار قرار گرفت و با استفاده از شبیه‌سازی مونت‌کارلو، حالت‌های مختلفی از ضخامت و درصد ترکیبات برای آن بررسی شد. در نهایت با توجه به گستردگی حالت‌های ممکن و زمان‌بر بودن استفاده از روش مونت‌کارلو، از روش یادگیری ماشین و شبکه عصبی برای پیش‌بینی مقادیر مربوط به حالت‌های مختلف در بررسی عملکرد حفاظ استفاده شد.

مواد و روش‌ها

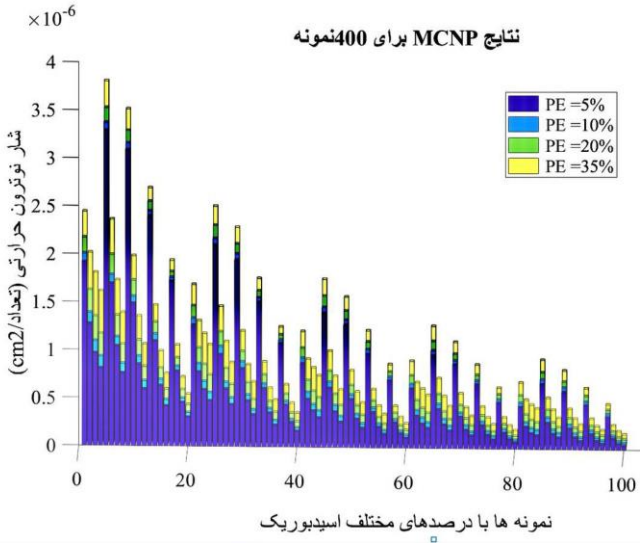
شبیه‌سازی

هندسه شبیه‌سازی شده در کد MCNPX مطابق شکل ۱ است [۳] که در آن چشمه ^{241}Am-Be با شعاع ۵ میلی‌متر و ارتفاع ۲ سانتی‌متر از لایه اول قرار گرفته است. لایه اول مکعبی از جنس پلی‌اتیلن به‌عنوان کندکننده و لایه دوم مکعبی حاوی کامپوزیت ترکیبی از پلی‌متیل متاکریلات و پلی‌اتیلن و اسیدبوریک به عنوان حفاظ در فاصله ۱میلی‌متری از لایه اول قرار دارد و یک آشکارساز استوانه‌ای ^{3}He به فاصله ۱ میلی‌متر از حفاظ کامپوزیتی قرار داده شده است. در پژوهش حاضر، همان‌طور که در جدول ۱ نشان داده شده است، چهار پارامتر شامل درصد وزنی پلی‌اتلین، درصد وزنی اسیدبوریک به‌کار رفته در کامپوزیت، ضخامت لایه اول (پلی‌اتیلن) و ضخامت کامپوزیت که به‌ترتیب با A، B، C و D برچسب‌گذاری شده، درنظر گرفته شده‌اند. با تغییر هر پارامتر با جایگشت‌های مختلف، در مجموع ۴۰۰ کد MCNPX اجرا گردید. نتایج مربوط به اندازه‌گیری شار نوترون گرمایی در شکل ۲ گزارش شده است. خطاهای نسبی در تمام شبیه‌سازی‌ها کم‌تر از ۵ درصد است. محدوده انرژی نوترون‌های گرمایی ۰/۵ eV درنظر گرفته شده است.



شکل ۱ : هندسه شبیه‌سازی شده در کد MCNPX.۱) چشمه نوترون. ۲) مکعب پلی اتیلن به عنوان کندکننده. ۳) مکعب حاوی کامپوزیت ترکیبی از پلی‌متیل متاکریلات و پلی-تیلن و اسیدبوریک به عنوان حفاظ. ۴) آشکارساز.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل۲: نتایج اجرای کد MCNP برای ۴۰۰ حالت مختلف جدول ۱.

جدول ۱: چهار پارامتر مختلف در نظر گرفته شده برای بهینه‌سازی حفاظ.

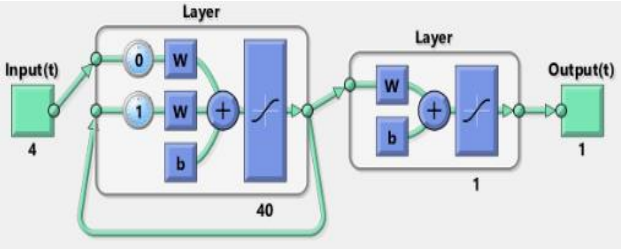
ضخامت کامپوزیت (cm) D	ضخامت پلی‌اتیلن C (cm)	درصد اسید بوریک B	درصد پلی‌اتیلن A
۱	۲	۱۰%	۵%
۲	۴	۲۰%	۱۰%
۳	۶	۳۰%	۲۰%
۴	۸	۴۰%	۳۵%
-	۱۰	۵۰%	-

شبکه عصبی مصنوعی (ANN)

ANN (شبکه عصبی مصنوعی) ابزاری قدرتمند برای پیش‌بینی، طبقه‌بندی و بهینه‌سازی است و براساس عملکرد شبکه‌های عصبی بیولوژیکی ساخته شده است. عنصر اساسی پردازش ANN یک نورون مصنوعی است. ANNها را می‌توان به‌عنوان یک سیستم ریاضی تعریف کرد که شامل عناصر پردازشی ساده‌ای به نام نورون است که به طور موازی در حال اجرا هستند و می‌تواند به‌صورت یک یا چند لایه تولید شود. شبکه‌های چند لایه پرسپترون (MLP) پرکاربردترین نوع شبکه‌های عصبی هستند. MLP برای آموزش شبکه از تکنیک یادگیری تحت نظارت استفاده می‌کند [۴] در این مقاله از این روش برای آموزش ماشین استفاده شده است.

نتایج

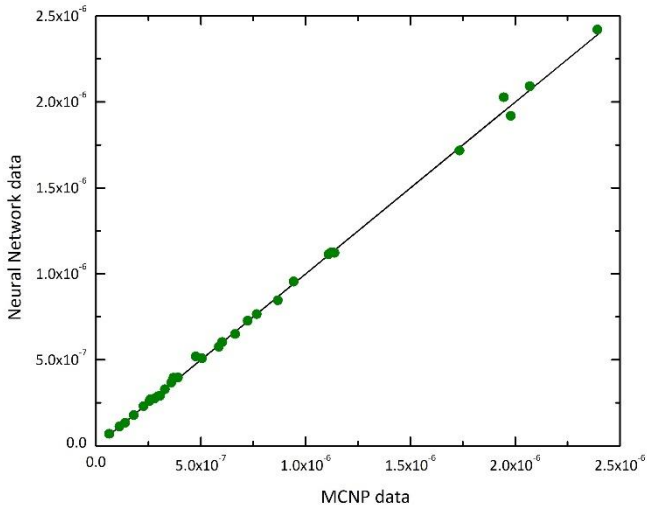
از نتایج به‌دست آمده از اجرای کد MCNP، ۳۶۹ حالت برای یادگیری به ماشین داده شد، بطوری‌که پارامترهای جدول ۱ با جایگشت‌های مختلف به‌عنوان ورودی و شار نوترون گرمایی محاسبه شده، به‌عنوان خروجی به شبکه عصبی آموزش داده شد. شبکه عصبی استفاده شده با کد متلب که در شکل ۳ نمایش داده شده از دولایه پریسپترون با ۴۰ نورون تشکیل شده است. آموزش شبکه MLP ارائه شده توسط الگوریتم Levenberg-Marquardt (LM) انجام شد. شرایط مختلف درون محدوده اعداد ورودی شبکه در ۳۱ حالت جهت آزمون به شبکه داده شد و نتایج به‌دست آمده از شبکه عصبی با نتایج اصلی مقایسه شد (شکل ۴). همچنین برای بررسی عملکرد شبکه، ۱۵ داده خارج از محدوده داده آموزشی به شبکه داده شد و نتایج با مقادیر واقعی مقایسه گردید که در شکل ۵ و جدول ۲ ارائه شده است.



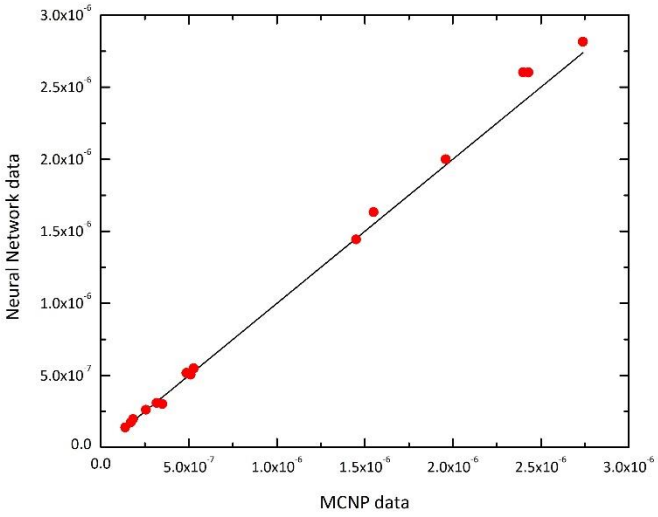
شکل۳: طرح شبکه عصبی به کار برده شده جهت یادگیری ماشین.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

۶	۲۶/۰	۲۴/۰	۸/۴۵
۷	۲۶/۰	۲۴/۳	۷/۰۷
۸	۵/۱۶	۴/۸۷	۵/۹۵
۹	۲۰/۰	۱۹/۶	۲/۰۴
۱۰	۱۴/۴	۱۴/۵	۰/۴۱
۱۱	۳/۰۹	۳/۱۷	۲/۵۲
۱۲	۲/۶۰	۲/۵۷	۱/۱۶
۱۳	۳/۰۱	۳/۴۹	۱۳/۷۵
۱۴	۱/۷۳	۱/۷۰	۱/۷۶
۱۵	۱/۳۸	۱/۳۸	۰



شکل۴: مقایسه داده‌های شبکه عصبی و داده‌های کد MCNP برای ۳۱ داده آزمون.



شکل۵: مقایسه داده‌های شبکه عصبی و نتایج واقعی برای ۱۵ داده آزمون خارج از بازه آموزش داده شده به ماشین.

جدول ۲: مقایسه نتایج شار نوترون‌های گرمایی مربوط به کد MCNP و شبکه عصبی برای ۱۵ حالت خارج از بازه آموزش داده شده.

نمونه	شار نوترون گرمایی ($\times 10^{-7}$)		خطای نسبی (٪)
	شبکه عصبی	MCNPX	
۱	۲۸/۲	۲۷/۴	۲/۷۷
۲	۱۶/۳	۱۵/۵	۵/۳۵
۳	۵/۰۶	۵/۱۰	۰/۷۸
۴	۵/۴۸	۵/۲۷	۳/۹۸
۵	۱/۹۶	۱/۸۳	۷/۱۰

نتیجه‌گیری

در بررسی انجام شده طبق نتایج به دست آمده از تغییر درصدهای ترکیب حفاظ شبیه‌سازی شده بر اساس مرجع [۳] و ضخامت‌های آن در کد MCNP، در حالت کلی افزایش درصد پلی‌اتیلن موجود در کامپوزیت باعث افزایش شار نوترون‌های گرمایی می‌گردد از این‌رو، افزایش درصد وزنی پلی‌اتیلن موجود در کامپوزیت توصیه نمی‌شود. نتایج نشان داد وجود ۵ درصد پلی‌اتیلن در کامپوزیت برای دستیابی به شار پایین‌تر کافی است. همچنین با توجه به شکل‌های ۴ و ۵ و جدول ۲، نتایج به‌دست آمده از شبکه عصبی با نتایج کد MCNP هم‌خوانی دارد. این نتیجه امیدبخش استفاده از روش یادگیری ماشین برای طراحی حفاظ و بهینه‌سازی آن، که مستلزم بررسی حالت‌های مختلف از طریق اجرای اجرای برنامه‌های متعدد و زمان‌بر مونت کارلو است، می‌باشد.

منابع

[1] E. Mansouri, A. Mesbahi, R. Malekzadeh, A. Ghasemi Janghjoo, M. Okutan. A review on neutron shielding performance of nanocomposite Materials. International Journal of Radiation Research, October 2020
[2] M.N. Nasrabadi, G. Baghban. Neutron shielding design for ^{241}Am–Be neutron source considering different sites to

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

achieve maximum thermal and fast neutron flux using MCNPX code. Annals of Nuclear Energy 59 (2013) 47–52

[3] شقایق شهرام، سید فرهاد مسعودی، شروین احمدی و اسماعیل بیات. طراحی و ساخت حفاظ چشمه نوترون با استفاده از کامپوزیت پلی‌متیل‌متاکریلات حاوی اسیدبوریک و پلی‌اتیلن ساخته شده به‌وسیله پلیمریزاسیون درجا مجله سنجش و ایمنی پرتو، جلد ۸، شمارهٔ ۶، پاییز ۱۳۹۹ ، صفحه ۱۱-۱۸.

[4] Yadollahi, A., Nazemi, E., Zolfaghari, A., Ajorloo, A.M., 2016.Optimization of thermal neutron shield concrete mixture using artificial neural network. Prog. Nuclear Engineering and Design 305 (2016) 146–155

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی تاثیر فاصله شی نسبت به چشمه و آشکارساز در کیفیت تصاویر سیستم رادیوگرافی نوترونی مبتنی بر استفاده از دستگاه IECF

محرابی ، محسن[۱] ؛ وثوقی، سارا[۱] ؛ سالک ، نفیسه[۲*] ؛ قپانوری ، مریم[۳]

[۱] پژوهشکده کاربرد پرتوها، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، تهران

[۲] پژوهشکده چرخه سوخت هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، تهران

[۳] پژوهشکده پلاسما و گداخت هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، تهران

چکیده

یکی از مفیدترین تکنیک‌های غیرمخرب برای تصویربرداری از اجسام با عدد اتمی پایین که داخل اجسامی با عدد اتمی بالا قرار گرفته اند، رادیوگرافی با کمک نوترون‌های سریع (FNR) است. دستگاه هم جوشی هسته ای به روش محصورسازی الکتروستاتیکی جرمی (IECF) به دلیل توانایی آن در تولید نوترون های سریع با شار بالا یک دستگاه عالی برای رادیوگرافی نوترونی است. در این مطالعه، تأثیر پارامترهای هندسی بر تصاویر به دست آمده توسط یک سیستم FNR با استفاده از کد مونت کارلو MCNPX2.7 مورد بررسی قرار گرفت. عدم وضوح هندسی تصاویر را می توان با بهینه سازی فاصله منبع-شی و شی-آشکارساز کاهش داد. نتایج نشان می‌دهد که برای فواصل آشکارساز-شی بزرگتر از پنج برابر اندازه ضلع شی عمود بر محور پرتو، سهم نوترون های پراکنده تقریباً ۰/۱ درصد از نوترون های انتقالی است. لذا فاصله بهینه شی-آشکارساز ۵۰ سانتی متر و فاصله بهینه منبع-شی با توجه به محدودیت فضای آزمایشگاهی، ۱۵۰ سانتیمتری در نظر گرفته شد.

واژه های کلیدی: رادیوگرافی نوترون سریع، IECF ، مونت کارلو، بهینه سازی.

Investigation of Effects of Source and Detector Distance from Object on Neutron Radiographic Image Quality using IECF

Mehrabi, Mohsen[1]; Vosoughi, Sara[1]; Salek, Nafise[2*]; Ghapanvari, Maryam[3]

[1] *Radiation Application Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute (NSTRI), Tehran.*
[2] *Nuclear Fuel Cycle Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute (NSTRI), Tehran.*
[3] *Plasma and Nuclear Fusion Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute (NSTRI), Tehran.*

Abstract

One of the most useful non-destructive techniques for imaging low Z materials hidden behind high Z materials is fast neutron radiography (FNR). Inertial Electrostatic Confinement Fusion (IECF) as a small neutron source is an excellent apparatus for neutron radiography because of its ability to generate high-flux fast neutrons. In this study, the effects of geometric parameters on images obtained by a FNR system were investigated using MCNPX2.7 Monte-Carlo code. Geometric unsharpness can be reduced by optimizing the source-object and object-detector distance. The results showed that the contribution of scattered neutrons is approximately 0.1% of that of transmitted ones for object-detector distances greater than five times the size of the side of the object perpendicular to the beam axis. The optimal detector-object distance was 50 cm and the optimal source-object distance was considered 150 cm.

***Keywords**: Fast Neutron Radiography, IECF, Monte-Carlo, Optimize.*

PACS No. ۸۹

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مقدمه

نوترون رادیوگرافی ایجاد تصویر از اشیاء به وسیله عبور تابش نوترون از آن می‌باشد. تصویر شکل گرفته بر اساس تضعیف باریکه نوترونی عبوری از شیء مورد نظر می‌باشد که بسیار شبیه به تصویربرداری با اشعه ایکس است [۱]. با توجه به متفاوت بودن نحوه تضعیف نوترون و اشعه ایکس در ماده، ایجاد تصویر توسط اشعه ایکس برای بعضی از مواد تقریبا غیرممکن است این در حالیست که تصویربرداری از همان ماده با استفاده از باریکه نوترونی به‌راحتی امکان‌پذیر است. مزیت اصلی نوترون رادیوگرافی، تصویر برداری از عناصر سبک در حضور اتم های سنگین می‌باشد. بنابراین رادیوگراف‌های نوترونی قابلیت تشخیص اجزای جزئی که در تصویربرداری اشعه ایکس قابل مشاهده نیست را دارند.

در روش رادیوگرافی نوترونی به‌منظور حصول تصویر با کیفیت بالا، باریکه موازی از نوترون‌ها با شار از مرتبهٔ بیشتر از $n/s.cm^2$ 10^4 مورد نیاز می‌باشد. هرچه باریکه نوترونی شار بیشتر و واگرایی کمتری داشته باشد کیفیت تصاویر بالاتر خواهد بود. عبور این باریکه نوترونی از هر شیء و اثرات تضعیف شدت باریکه، تصویر آن شیء را بر روی فیلم رادیوگرافی ایجاد خواهد نمود [۲].

به‌منظور انجام رادیوگرافی نوترونی می‌توان از منابع نوترونی مناسب مانند راکتورهای تحقیقاتی شکافت، چشمه‌های رادیواکتیو مانند امرسیوم–برلیوم و یا کالیفرنیوم–۲۵۲، شتابدهنده‌ها و مولدهای نوترونی استفاده نمود [۳]. دستگاه محصورسازی الکترواستاتیکی–اینرسی (IECF[1]) بعنوان یک مولد نوترون، از معدود دستگاه‌های گداخت هسته‌ای است که کارکرد پیوسته داشته و می‌تواند منبع تولید انواع پرتوهای یون‌ساز باشد. در صورت تزریق گاز دوتریوم، نوترن های ناشی از واکنش گداخت D-D تولید می‌شوند که دارای انرژی ۲/۴۵ MeV هستند و در صورت تزریق مخلوط گاز تریتیوم و دوتریوم، نوترون های حاصل از واکنش گداخت D-T، با انرژی ۱۴/۱ MeV تولید می‌شود. در این دستگاه شاری در حدود 10^{11} و در شرایطی 10^{13} نوترون بر ثانیه (n/s) می‌تواند گسیل شود [۴].

در مطالعه حاضر، تاثیر فاکتورهای هندسی بر کیفیت تصویر حاصل از رادیوگرافی نوترونی با دستگاه IECF موجود در سازمان انرژی اتمی ایران، با استفاده از کد مونت‌کارلوی MCNPX2.7، و برای نوترون‌هایی با انرژی ۲/۴۵ MeV مورد بررسی قرار گرفت.

روش‌ها

دستگاه نوترون رادیوگرافی معمولی متشکل از یک منبع نوترون، یک کولیماتور برای شکل دادن نوترون‌ها به صورت یک بیم نسبتاً جهت‌دار با میزان پراکندگی حداقلی، جسم مورد بررسی و یک مجموعه آشکارساز حساس به نوترون برای ثبت تصویر است. پراکندگی پرتوها در جهت‌های گوناگون اثر نامطلوبی در کیفیت تصویر نهایی خواهد داشت لذا یکی از مهم‌ترین بخش‌های رادیوگرافی نوترون هنگامی که منبع پرتو نوترونی به صورت نقطه‌ای است، موازی‌سازی پرتو می‌باشد [۵].

به منظور درک اثرات فیزیکی و تعیین کمی نتایج آنها در رادیوگرافی نوترون، شبیه‌سازی مونت کارلو آزمایش‌ها، ابزار مؤثری است. تأثیر پارامترهایی همچون انرژی نوترون، پراکندگی نوترون، واگرایی پرتو، حساسیت آشکارساز، حفاظ سازی و غیره را می‌توان توسط شبیه‌سازی بررسی نمود و شرایط بهینه جهت حصول بهترین تصویر را تعیین کرد. در مقایسه با حل معادلات دیفرانسیل انتقال نوترون به صورت عددی، شبیه‌سازی مونت کارلو ابزار مناسبی برای محاسبه رادیوگرافی نوترونی است.

در این مطالعه، شبیه‌سازی با استفاده از کد مونت‌کارلوی MCNPX2.7 انجام شده است. این کد از داده‌های کتابخانه ENDF/B–VII برای سطح مقطع کل و جذب میکروسکوپیک نوترون حرارتی استفاده می‌کند و برهم کنش‌های نوترونی را برای انرژی‌های کمتر از ۲۰ MeV به خوبی توصیف می‌کند [۶].

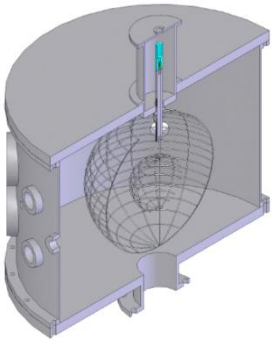
در این شبیه‌سازی، با توجه به تشکیل پلاسمای داغ و چگال در مرکز کاتد و تقارن سیستم محفظه دستگاه، ناحیه تابش نوترون به صورت یک چشمه نوترونی همسانگرد در مرکز کاتد در نظر گرفته شد. محفظه خلاء به صورت استوانه‌ای با قطر و ارتفاع ۶۰ cm و ضخامت ۱ cm از جنس استیل ضدزنگ در نظر گرفته شده‌است.

[1] Inertial Electrostatic Confinement Fusion

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

توزیع انرژی نوترون‌ها، بصورت تک انرژی با انرژی ۲/٤٥ MeV (گاز کاری دوتریوم) با شار 10^{7} n/s در نظر گرفته شده است. شماتیک هندسه شبیه سازی شده در شکل ۱ نشان داده شده است.

از آنجاییکه یکی از کاربردهای مهم نوترون رادیوگرافی تشخیص مواد سبک در حضور مواد سنگین می‌باشد، در این مطالعه به‌منظور بررسی فاکتورهای هندسی تاثیر گذار بر تصویر، از یک قطعه سرب ضخیم حاوی حفره‌هایی با سایزهای متفاوت استفاده شده است. این حفره‌ها به طول ۱۰ سانتی‌متر و دارای قطرهای مختلف ۰/۵ میلی‌متر ، ۱ میلی‌متر ، ۲ میلی‌متر ، ۳ میلی‌متر و ٤ میلی‌متر در نظر گرفته شدند.



شکل ۱ : شماتیک هندسه شبیه سازی شده در MCNPX.

از آنجائیکه چشمه نوترونی به صورت همسانگرد میباشد لذا تابش نوترونی واگراست و باعث میگردد بزرگنمایی و جابجایی مکانی تصویر نسبت به شئ رخ دهد که میتواند منجر به خطا در تشخیص گردد.

به همین منظور و برای کاهش اثرات بزرگنمایی و جابجایی، تمهیداتی میتوان انجام داد از جمله کم کردن فاصله شئ تا آشکارساز یا افزایش فاصله منبع پرتو تا آشکارساز. علاوه بر این، دو دلیل می‌تواند در تصویر محو شدگی ایجاد نماید یکی اندازه نقطه کانونی تشعشع[۲] که منجر به محوی هندسی[۳] می‌شود و دومی حرکت شئ که منجر به محوی حرکتی[٤] می‌گردد. محوی مربوط به اندازه نقطه کانونی با کاهش فاصله شئ تا آشکارساز و یا افزایش فاصله منبع پرتو تا شئی کاهش می‌یابد. بنابراین بهینه سازی پارامترهای هندسی همچون فاصله منبع پرتو تا شیء، فاصله منبع تا آشکارساز و واگرایی باریکه جهت انجام نوترون رادیوگرافی مهم می‌باشد. در این پژوهش به منظور بررسی کیفیت تصویر ایجاد شده در نوترون رادیوگرافی تاثیر پارامترهای فاصله منبع پرتو تا شئ و نیز فاصله آشکار ساز تا شئ مورد بررسی قرار گرفته است.

به منظور بررسی فاکتورهای هندسی تاثیرگذار بر تصویر و با توجه به محدودیت فضای آزمایشگاهی موجود، فاصله جسم تا منبع در ٤ حالت ۲۰، ٦٥ ، ۱٥۰، ۳۰۰ سانتیمتر و فاصله آشکارساز تا جسم در ٤ حالت از ۱۰ تا ۷۰ سانتیمتر با گامهای ۲۰ سانتیمتری مورد بررسی قرار گرفت.

نتایج و بحث

در شبیه سازی انجام شده تعداد ذرات نوترون ترابرد شده در حدود 10^{7} ذره می‌باشد. همچنین در تمام محاسبات و شبیه‌سازی‌ها خطای آماری زیر ۱/۲٪ در نظر گرفته شد تا کیفیت تصویربرداری نوترون بالا رود. نتایج شبیه سازی برای میزان شار نوترون آشکار-سازی شده‌ی حاصل از پرتوهای مستقیم، نوترون‌های پراکنده، شار کل نوترون و نیز نسبت پرتوهای پراکنده به پرتوهای مستقیم در صفحه تصویر برای فواصل مختلف چشمه تا شیء، چشمه تا صفحه آشکارساز و واگرایی باریکه در جدول ۱ آورده شده است.

همانگونه که از جدول ۱ دیده می‌شود، برای فاصله چشمه تا شیء ۲۰ سانتیمتری، به دلیل واگرایی زیاد باریکه پرتوهای چشمه نوترونی با زاویه بیم ۱۹,۸٥ درجه، با افزایش فاصله آشکارساز تا جسم، نسبت نوترون های پراکنده به نوترونهای مستقیم از روند مشخصی پیروی نمی کند. اما برای فواصل ٦٥، ۱٥۰ و ۳۰۰ سانتیمتر با افزایش فاصله آشکارساز تا نمونه، به دلیل کاهش زاویه فضایی باریکه نوترونی و ایجاد باریکه ای تقریبا موازی، سهم پراکندگی در رادیوگراف‌ها کاهش می‌یابد. همچنین همانطور که از جدول ۱ قابل مشاهده است، سهم نوترون‌های پراکنده شده برای فواصل بزرگتر از پنج برابر اندازه ضلعی از نمونه که عمود بر محور بیم است، ناچیز می‌باشد. برای فاصله آشکارساز تا نمونه ٥۰ سانتیمتر، سهم نوترون های پراکنده تقریبا ۰,۱٪ از سهم نوترون‌های عبوری است. علاوه بر این نتایج

[۲] Focal Spot Size
[۳] Geometric Unsharpness
[٤] Movement Unsharpness

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

نشان میدهند که برای فواصل آشکارساز تا شیء بزرگتر از ۵۰ سانتیمتر، نسبت پرتوهای پراکنده به عبوری با شیب کمتری کاهش یافته و تقریبا ثابت است. بنابراین بهینه فاصله اشکارساز تا شیء ۵۰ سانتیمتر در نظر گرفته شد.

نتیجه گیری

در این تحقیق، تاثیر فاکتورهای هندسی بر تصاویر شکل گرفته از تکنیک FNRG، با استفاده از کد شبیه‌سازی مونت کارلوی MCNPX، برای نوترون های حاصل از واکنش گداخت D-D در دستگاه IECF با انرژی ۲/۴۵ MeV مورد مطالعه قرار گرفت.

جدول۱ : شار نوترونی پرتوهای عبوری، پراکنده و نسبت پرتوهای پراکنده به پرتوهای عبوری در صفحه تصویر برای فواصل مختلف شیء تا چشمه، شیء تا آشکارساز و زوایه واگرایی پرتو متفاوت.

Source to Object Distance (SOD) (cm)	Cone Beam Angle (Ô)	Object to Image Receptor Distance (OID) (cm)	Direct Ray-Trace Source Image Flux (#/cm^2)	Contributed Ray-Trace Source Image Flux(#/cm^2)	Total Image Flux (#/cm^2)	Contributed to Direct Ratio
۲۰	۱۹,۸۵	۱۰	۳,۵۸E+۵	۱,۲۷E+٤	۳,۷۱E+۵	۳,۵۵E-۲
		۳۰	۷,۹۱E+٤	۱,٦٦E+۳	۸,۰۸E+٤	۲,۱۰E-۲
		۵۰	۲,۰۰E+٤	٦,۳۹E+۲	۲,۰۷E+٤	۳,۱۹E-۲
		۷۰	۱,۱۹E+٤	۳,۱۹E+۲	۱,۲۲E+٤	۲,٦۷E-۲
٦۵	٦,۱٦	۱۰	۷,۷۳E+٤	۱,٦۱E+۳	۷,۸۹E+٤	۲,۰۸E-۲
		۳۰	٤,۵٤E+٤	۱,۹۵E+۲	٤,۵٦E+٤	٤,۲۹E-۳
		۵۰	۲,۷۰E+٤	۸,٤۷E+۱	۲,۷۱E+٤	۳,۱٤E-۳
		۷۰	۱,٦٦E+٤	٤,۱۵E+۱	۱,٦٦E+٤	۲,۵۱E-۳
۱۵۰	۲,٦۷	۱۰	۱,٦۵E+٤	۳,۲۵E+۲	۱,٦۹E+٤	۱,۹٦E-۲
		۳۰	۱,٤۱E+٤	٤,۰۲E+۱	۱,٤۱E+٤	۲,۸٦E-۳
		۵۰	۱,۱۵E+٤	۱,۸۳E+۱	۱,۱۵E+٤	۱,٦۰E-۳
		۷۰	۸,۹٤E+۳	۱,۳٤E+۱	۸,۹۵E+۳	۱,۵۰E-۳
۳۰۰	۱,۳۳	۱۰	٤,۳٤E+۳	۸,۱۳E+۱	٤,٤۲E+۳	۱,۸۷E-۲
		۳۰	۳,۹۷E+۳	۱,۰۵E+۱	۳,۹۸E+۳	۲,٦۵E-۳
		۵۰	۳,٦۵E+۳	٤,۳۷	۳,٦٦E+۳	۱,۲۰E-۳
		۷۰	۳,۳۷E+۳	۲,۹٦	۳,۳۷E+۳	۸,۷۸E-٤

بر اساس نتایج بدست آمده برای فواصل OID بزرگتر از پنج برابر اندازه ضلعی از نمونه که عمود بر محور بیم است، سهم نوترون های پراکنده تقریبا ۰,۱٪ از سهم نوترون‌های عبوری است لذا بهینه فاصله اشکارساز تا شیء ۵۰ سانتیمتر و بهینه فاصله شیء تا چشمه با توجه به محدودیت فضای آزمایشگاهی، ۱۵۰ سانتیمتری، انتخاب گردید. نتایج این مطالعه را میتوان در آزمایشات اولیه برای پروژه نوترون رادیوگرافی با استفاده از دستگاه IECF موجود در سازمان انرژی اتمی، مورد استفاده قرار داد.

مرجع‌ها

[۱] P. von der Hardt and H. Röttger; "*Neutron radiography handbook: nuclear science and technology*"; Springer Science & Business Media, (2012).

[۲] H. Berger; "*Practical applications of neutron radiography and gaging*"; ASTM International, (1976).

[۳] N. Tsoulfanidis and S. Landsberger; "*Measurement & detection of radiation*"; CRC press, (2021).

[٤] D. L. Williams, C. M. Brown, D. Tong, A. Sulyman, and C. K. Gary; "A Fast Neutron Radiography System Using a High Yield Portable DT Neutron Source"; *Journal of Imaging* **6**, (2020) 128.

[۵] G. MacGillivray; "*Neutron radiography collimator design*"; Nray Services Inc., (2011).

[٦] N. Li, S.-H. Kim, J.-H. Suh, S.-H. Cho, J.-G. Choi, and M.-H. Kim; "Virtual X-ray imaging techniques in an immersive casting simulation environment"; *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* **262**, (2007) 143-152.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی اثرات نقوش لیزر بر روی سطح هدف در راه انداز مستقیم گداخت محصور شدگی لختی

غلامی میان پشته، میترا ؛ قاسمی زاد، عباس* ؛ عاشوری، حدیقه

گروه فیزیک ، دانشکده علوم پایه ، دانشگاه گیلان ، رشت

چکیده

بررسی اثر نقوش لیزری بر روی پوسته سوخت هدف، که از نتایج شبیه‌سازی های مختلف به دست آمده است، نشان می دهد که اثرات نقوش لیزر منجر به تغییر شکل های غیر یکنواخت پوسته سوخت می شود. چنین غیر یکنواختی هایی، باعث توسعه ی ناپایداری های هیدرودینامیکی از جمله ناپایداری های ریلی-تیلور است. از طرفی برآورد های انجام شده نشان می دهد، که تابش پرتو لیزری نباید هیچ تاثیری بر جامد دوتریوم-تریتیوم DT داشته باشد، زیرا یخ (جامد) DT ممکن است شروع به تغییر فاز زود هنگام کند، یا ممکن است سبب ذوب شدن پوسته یا قطع توسط پالس لیزری شود، که این ممکن است اولین علت از دست دادن یکپارچگی سوخت DT باشد. از طرفی به دلیل فشار به وجود آمده ناشی از پرتو لیزری، موج ضربه‌ای به سمت سوخت DT روانه می‌شود که منجر به ذوب یا تبخیر سوخت و یا باعث برش سطح کندگی یا پیش گرمایش سوخت DT می شود و در نهایت این فرآیند ها، باعث تغیر در رفتار های شبه هیدرودینامیکی کاذب می گردد.

واژه های کلیدی: *گداخت هسته ای، راه انداز مستقیم، هدف سوختی، نقوش لیزری*

Investigation of the laser-imprinting effects on target surface in direct-drive inertial confinement fusion

Gholamimianposhteh, Mitra; Ghasemizad, Abbas; Ashouri, Hadigheh

Department of Physics, Faculty of Science, University of Guilan, Rasht

Abstract

Investigation of the effect of laser-imprinting surface of fuel target, obtained from the results of various simulations, shows that the effects of laser-imprinting leads to non-uniform deformation of the fuel shell. Such non-uniformities lead to the development of hydrodynamic instabilities, including Rayleigh-Taylor instability. Additionally, estimates show that the laser irradiation should have no effect on DT solid, because it may begin to early change phase, or may cause the shell or ablator to melt by pulse laser, and it may be the first reason for the loss of DT fuel integrity. And due to the pressure by the laser beam, a shock wave is sent to the DT fuel, which leads to melting or evaporation of the fuel, or causes the shearing of the ablator or preheating of the DT fuel. Eventually, these processes alter pseudo-hydrodynamic behaviors.

Keywords: *Nuclear Fusion, Direct Drive, Fuel Target, Laser Imprinting*

PACS No.28

مقدمه

لازمه‌ی ادامه‌ی زندگی بشریت، استفاده از منابع جدید بی‌پایان انرژی است و یکی از راه‌های تحقق آن، استفاده از انرژی هسته‌ای است. دو روش دست‌یابی به انرژی هسته‌ای، شکافت و گداخت می‌باشد که امروزه تلاش‌های زیادی برای دستیابی به انرژی هسته ای از طریق گداخت در حال انجام است، بنابراین ارائه‌ی راهکار هایی جهت غلبه بر مشکلات پیش‌روی این فناوری، یکی از چالش های اساسی است. در فرآیند گداخت لختی، ساچمه‌ی سوخت حاوی دوتریوم-تریتیوم از جهات مختلف به صورت متقارن و یکنواخت، توسط یک پالس لیزری پر انرژی تحت فشار قرار می-

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

گیرد. بر اثر برهم‌کنش میان پالس لیزری و سطح ساچمه‌ی سوخت، یونش موضعی ایجاد می شود و یک انتقال جرمی برون سو، به علت کنده‌شدن ذرات در اثر برهم‌کنش لیزر با ماده، به وجود می‌آید که این انتقال جرمی برون‌سو و فشار کندگی، سبب به وجود آمدن یک موج فشار درون‌سو می‌شود. در قرص سوخت در حال فشردن، اگر دما و چگالی یونی به اندازه‌ی کافی زیاد باشد، واکنش گداخت هسته‌ای رخ می دهد. بر اثر اندرکنش لیزر با سطح هدف، کپسول حاوی سوخت دوتریوم-تریتیوم از طریق اثر موشک(راکت) از بین می‌رود. در این صورت باریکه‌های همپوشان، باعث شدت‌های غیریکنواختی بر روی سطح هدف می‌شوند که این خود باعث فرسایش غیر یکنواخت سطح و در نتیجه ایجاد اختلالاتی در چگالی، فشار، دما و فرکانس برخورد می‌شود. این اثر که می‌تواند سبب بروز ناپایداری‌هایی مثل ناپایداری ریلی-تیلور گردد؛ به فرآیند نقوش لیزری معروف است. بنابراین شناخت و کاهش اثرات نقوش لیزری، امری ضروری در موفقیت طرح‌های گداخت لختی می‌باشد. دراین مقاله به بررسی برهم‌کنش لیزر و ماده در طول گذار فاز از حالت جامد به حالت پلاسما، با استفاده از نتایج شبیه‌سازی های هیدرودینامیکی و نتایج به دست آمده از مقالات پیشین پرداخته‌ایم.

روش

در شبیه‌سازی های انجام شده متداول، از گذار فاز جامد به پلاسما چشم پوشی شده است؛ و فرض بر این است که از ابتدا سطح هدف در حالت پلاسما قرار دارد که در نتیجه‌ی آن چگالی الکترون آزاد از چگالی الکترون بحرانی بزرگتر است که بدیهی است به علت دی‌الکتریک بودن سطح هدف (که معمولا از جنس پلاستیک است)، نا معتبر می‌باشد. بنابراین رویکردی که مبتنی بر در نظر گرفتن فرآیند حالت پلاسمای اولیه باشد، امری ضروری است. در مقاله دوشاتو و همکاران (۲۰۱۹) [۱] مدل جدیدی برای شبیه سازی این فرآیندها، مبتنی بر گذار حالت جامد به پلاسما ارائه شده است. برای بررسی این حالت، از مدل دو دمایی الکترون و یون استفاده شده است. در این مدل، دو فرض اساسی لحاظ شده است: ۱-حرکت دینامیکی الکترون نادیده گرفته شده است، ۲-چگالی الکترون توسط چگالی بحرانی پلاسما محدود شده است.

مدل‌سازی

هدف این بخش به دست آوردن نمونه‌ای متناسب با نتایج شبیه سازی‌های قبل و پیش‌بردی برای شروع شبیه‌سازی‌هایی با کمک کد پایتون در این زمینه می‌باشد. برای ارزیابی چگالی انرژی جذب شده، باید برخورد الکترون با ذرات دیگر بررسی شود که به آن فرکانس برخورد گفته می‌شود. فرکانس برخورد براساس انتقال تکانه است. فرکانس برخورد الکترون بستگی به وضعیت ماده‌ای که در آن قرار دارد، بررسی می شود. به‌طور کلی، گذار از حالت جامد به پلاسما به سه محدوده مختلف تقسیم می‌شود؛ ابتدا در حالت جامد که در آن برخورد الکترون با فونون مورد توجه است، و به آن محدوده‌ی الکترون-فونون گفته می شود؛ شروع اولین برهم‌کنش لیزر با سطح کندگی ساچمه‌ی سوخت که دما در این حالت زیاد نمی‌باشد. فرکانس برخورد در این حالت از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید [۲]

$$\nu_{ph}=\nu_{ph0}\, T_{il}/T_0 \qquad (۱)$$

در رابطه‌ی (۱)، ν_{ph0} فرکانس برخورد الکترون-فونون در دمای اتاق است که برابر است با $\nu_{ph0}=10^{14}\ s^{-1}$ و T_{il} و T_0 به ترتیب دمای شبکه‌یونی و دمای اتاق می‌باشند $(T_0=300\ k)$. در حالت بعدی در محدوده‌ی چند الکترون ولت نزدیک به انرژی فرمی، فرکانس برخورد الکترون، تحت سلطه‌ی مسیر آزاد میانگین الکترون می‌باشد [۳] و دو محدوده‌ی الکترون-فونون و الکترون-یون (محدوده‌ی اسپیتزر) با کمک محدوده‌ی مسیر آزاد میانگین باهم مرتبط می‌شوند، که از رابطه‌ی ۲ به دست می‌آید. در حالت آخر برخورد الکترون-یون در حالت پلاسما بررسی می‌شود؛ برای پلاسمای داغ از قانون اسپیتزر، رابطه (۳) استفاده می‌شود. با این تفاسیر، چشم‌پوشی از گذار فاز به دلیل برخورد های متفاوت الکترون در هر منطقه اجتناب ناپذیر است. برای ارزیابی چگالی انرژی جذب شده، فرکانس برخورد در هر سه محدوده محاسبه می شود:

$$\nu_{av}^{-1}=\nu_{mfp}^{-1}+\nu_{e\text{-}i}^{-1} \qquad (۲)$$

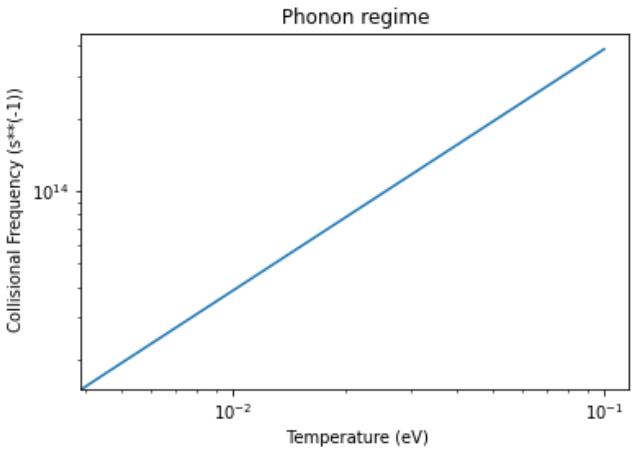
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

طبق رابطه‌ی (۲)، فرکانس برخورد در ناحیه‌ی مسیر آزاد میانگین الکترون به دست می‌آید که کران بالای فرکانس برخورد در این ناحیه برابر است با $\nu_{mfp}^{-1}=v_e\, n_a^{1/3}$ ، که ν_{e-i} فرکانس الکترون و یون، v_e ، n_a به ترتیب سرعت گرمایی الکترون و چگالی اتمی می‌باشند.

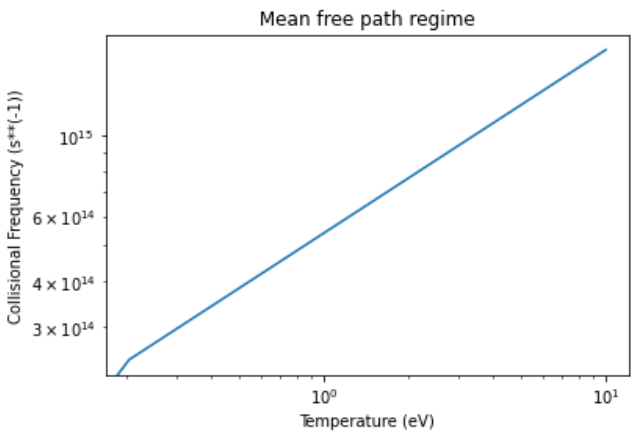
$$\nu_{spitzer}=4/3(2\pi)^{1/2}z_{av}e^4m_en_e/(m_ek_BT_e)^{3/2}\ln(\Lambda) \qquad (۳)$$

در رابطه‌ی (۳) z_{av} درجه یونش، e بار الکترون، m_e و n_e به ترتیب جرم و چگالی الکترون، $\ln(\Lambda)$ لگاریتم کولنی، T_e دمای الکترون در این محدوده و k_B ثابت بولتزمن می باشد. در شکل ۱، تغییرات فرکانس برخورد برحسب دمای الکترون در سه محدوده تعریف شده، رسم شده است.

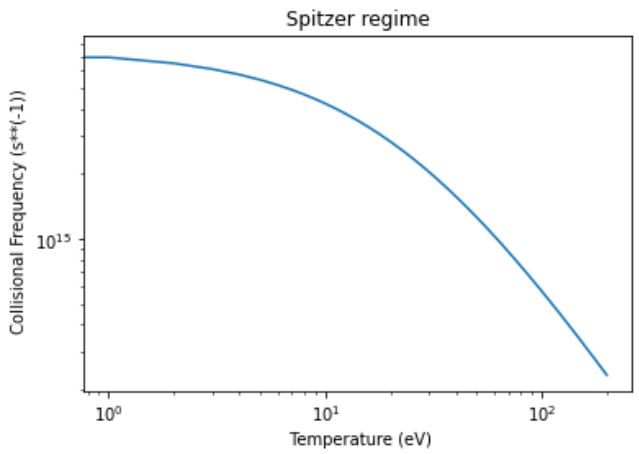
الف)



ب)



ج)



شکل.۱.تغییرات فرکانس برخورد برحسب دمای الکترون در سه محدوده‌ی به ترتیب از بالا: الف) الکترون-فونون، ب) مسیر آزاد میانگین الکترون، ج) اسپیتزر

در شکل (الف) مشاهده می‌شود که فرکانس برخورد توسط فونون ها یا ارتعاشات شبکه کنترل می‌شود و افزایش فرکانس برخورد با دما به دلیل افزایش جمعیت فونون‌ها می‌باشد [٤]. درجه حرارت بالاتر T_{il}، باعث چگالی بیشتر فونون‌ها و برخوردهای بیشتر می‌شود و از $0.1eV$ شروع به خارج شدن از حالت جامد می‌کند. در شکل (ب) شاهد یک ناپیوستگی به دلیل خارج شدن از حالت جامد هستیم. در دماهای چند الکترون‌ولت، فرکانس برخورد تحت شعاع مسیر آزاد میانگین الکترون است و با افزایش دما طبق نمودار، فرکانس برخورد رو به افزایش می‌باشد و هرچه دما به حالت پلاسمایی نزدیک تر می‌شود شاهد افزایش فرکانس برخورد خواهیم بود. در شکل (ج) همان‌طور که مشاهده می‌شود به دلیل برخورد الکترون‌ها با یون‌ها، حالت پلاسمایی به وجود آمده که در دماهای بالاتر به دلیل یونش، فرکانس برخورد کاهش می‌یابد؛ و فرکانس برخورد با دما به‌صورت $T_e^{-3/2}$ تغییر می‌کند.

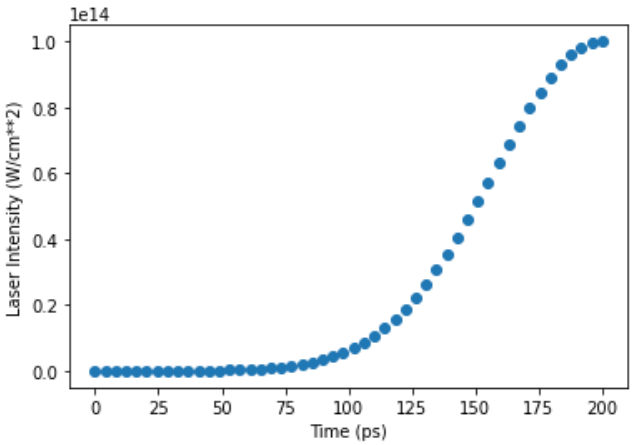
تغییرات کمیت شدت زمانی پالس لیزری بر حسب تابعی از زمان، با استفاده از رابطه‌ی (٤) را به دست می‌آوریم [٥]:

$$I(t)=I_0\exp(-4\ln2(t-t_{max})^2/\tau^2) \qquad (4)$$

که τ، طول مدت زمان یک پالس لیزری است که $\tau=100$ ps و $t_{max}=200$ ps در نظر گرفته شده است. t_{max} در این‌جا زمان بیشینه اندازه‌گیری شده می‌باشد. شدت بیشینه برابر $I_0=10^{14}$ W/cm^2

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

است، که این شدت، مشخصه‌ی مربوط به پالس‌های مورد استفاده در آزمایشات گداخت لختی برای شرطی کردن هدف می‌باشد. با توجه به داده‌های به دست آمده و کد نویسی های انجام شده در نرم افزار پایتون، نمودار شدت لیزری پالس بر روی هدف بر حسب تابعی از زمان به دست آمده؛ که مطابقت خوبی با مطالعات پیشین دارد. برای شدت هایی از مرتبه 10^{13} W/cm^2 ، سرعت یونش در حال بیشتر شدن می‌باشد به طوری که تبدیل به یونش کامل می‌شود؛ , در حدود ۱۰۰ پیکوثانیه انتظار می رود حالت پلاسمایی بیش از حد بحرانی تشکیل شده است، در نتیجه پالس لیزری متوقف می‌شود. همان‌طور که در شکل (۲) مشاهده می‌شود در ۱۰۰ پیکوثانیه، ماده شروع به تغییر فاز بر اثر شدت های به وجود آمده می‌کند. پس هرچه شدت بیشتر شود سبب مقیاس زمانی کوتاه می‌شود که این نتیجه، مقیاس زمانی جدیدی را برای گذار فاز تحمیل می‌کند که بدیهی است باعث حساسیت در انجام این فرآیند می‌شود. به طور کلی مقیاس زمانی ۱۰۰ پیکو ثانیه به شرایط واقعی مربوط می‌شود.



شکل.۲: تغییرات شدت زمانی لیزر بر حسب تابعی از زمان در مدت زمان پالسی 100 ps .

بر اثر این شدت‌ها، چگالی انرژی جذب شده لیزر باعث سرعت یونش بزرگ می‌شود که تاثیر چگالی آزاد اولیه را حذف می کند. این یونش به‌وجود آمده باعث تغییر در چگالی الکترون آزاد، دمای الکترون و فرکانس برخورد می‌شود و تغییر در این کمیت‌ها باعث ایجاد تغییر شکل‌های غیریکنواختی در پوسته می‌شود.

نتیجه گیری

نتایج اصلی این کار پژوهشی، مربوط به گذار فاز حالت جامد به پلاسما می باشد که مقیاس زمانی ۱۰۰ پیکوثانیه لازم است تا این گذار صورت گیرد. در ناحیه رخورد بین پالس لیزری و سطح هدف، شاهد به وجود آمدن لکه هایی خواهیم بود که این خود باعث به وجود آمدن حالت پلاسمایی می‌شود. براثر این لکه ها و نقوش، خواص ترمودینامیکی مانند فرکانس برخورد و چگالی بر اساس جذب غیر خطی، تحت تاثیر قرار می گیرند. فرکانس برخورد به دلیل بازده جذب لیزر، انتقال انرژی از الکترون ها به سیستم شبکه‌ی یونی را هدایت می کند، بنابراین ارائه‌ی مدلی برای تفسیر فرکانس برخورد الکترون به سمت پلاسمای متراکم امری ضروری می باشد. فرکانس برخورد تا زمانی که ماده در حالت جامد قرار دارد رو به افزایش است و به دنبال گذار فاز در زمان بیشتر از ۷۰ پیکوثانیه، شاهد کاهش فرکانس برخورد به دلیل برخورد الکترون–یون و جایگزینی آن با برخورد الکترون–فونون خواهیم بود. این فرکانس می‌تواند باعث از بین رفتن پیش‌از موعد سطح کندگی و حرکت به سمت حالت پلاسمایی شود که این امر سبب از بین رفتن سوخت می‌شود. تابش اولیه لیزری نباید تاثیری روی جامد دوتریوم–تریتیوم داشته باشد، اما براثر تابش، ممکن است سطح دوتریوم–تریتیوم، یکپارچگی خود را از دست دهد و دچار پیش گرمایش نامطلوبی شود که این خود باعث ذوب شدن سوخت می‌گردد.

مرجع‌ها

[۱] G. Duchateaul, S.X. Hu, A. Pineau, A. Kar, et all, (2019) “Modeling the Solid-to-Plasma Transition for Laser Imprinting in Direct-Drive Inertial confinement Fusion”, *physical Review E*, Vol. **100**, No. 3
[۲] E. G. Gamaly, (2011) “The Physics of Ultra-Short Laser Interaction with Solids at Non-Relativistic Intensities”, *Physics Reports*, Vol. **508**
[۳] K. Eidmann, J. Meyer-ter-Vehn, T. schlegel, S. Huller, (2000) “Hydrodynamic Simulation of Subpicosecond Laser Interaction with Solid-Density Matter”, *Physical Review E*, Vol. **62**
[۴] A. Pineau, B. Chimier, S. Hu, G. Duchateau, (2020) “Modeling the Electron Collision Frequency During Solid-to-Plasma Transition of Polystyrene Ablator for Direct-Drive Inertial Confinement Fusion Applications”, *Physics of Plasma*, Vol. **27**
[۵] V.N. Goncharov, T.R. Sangster, T.R. Boehly, S.X. Hu, et all, (2010) “Demonstration of the Highest Deuterium-Tritium Areal Density Using Multiple-Picket Cryogenic Designs on OMEGA”, *Physics Review Lett*, vol. **104**

*ghasemi@guilan.ac.ir

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

طراحی مفهومی حفاظ پرتوی سامانه آمایش و شیشه‌سازی پسماند پرتوزای سطح پایین و متوسط با استفاده از فناوری پلاسمای حرارتی مبتنی بر شبیه‌سازی مونت‌کارلو

قنبری، مائده[۱]؛ رحمانی، فائزه[۱]؛ دارستانی فراهانی، نیکو[۲]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران

[۲] پژوهشکده تحقیقات پلاسما و همجوشی هسته ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، تهران

چکیده

امروزه فناوری پلاسمای حرارتی، به عنوان یک روش جایگزین نوین برای سایر روش‌های موجود برای آمایش پسماندهای پرتوزا به شمار می‌رود. این مطالعه، بر مبنای یک فرآیند آمایش پلاسمای حرارتی طرح‌ریزی شد و یک سیستم ترکیبی سوزاندن_ شیشه سازی پلاسمایی در ابعاد آزمایشگاهی برای آمایش پسماندهای پرتوزا طراحی و شبیه‌سازی گردید. علاوه بر طرح اولیه جانمایی مشعل و ابعاد اولیه، ضخامت بهینه دیواره اصلی سامانه، یعنی حفاظ فولادی حدود ۱۲ cm تخمین زده شد تا آهنگ دز معادل در بیرون کوره به کمتر از حد مجاز ۱۰ $\mu Sv/h$ برسد.

واژه‌های کلیدی: *پسماند پرتوزای سطح پایین و متوسط، آمایش،فناوری پلاسمای حرارتی، حفاظ پرتوی.*

Conceptual design of radiation shield for vitrification system with thermal plasma technology for treating LILW using Monte Carlo simulation

Maedeh, Ghanbari[۱]; Faezeh, Rahmani[۱*]; Nikoo Darestani Farahani[۲]

[۱] *Department of Physics, K. N. Toosi University of Technology, Tehran*

[۲] *Plasma and Nuclear Fusion Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran*

* *Email: FRahmani@kntu.ac.ir*

Abstract

Today, thermal plasma technology (TPT) is considered as a new alternative method for the treatment of radioactive wastes. In this study, a radiation shield has been proposed for a laboratory scale design based on TPT and a plasma incineration- vitrification hybrid system for the treatment of Low and Intermediate Level Radioactive Waste (LILW). In addition to determining the dimension as well as the position of torches in the furnace, the optimal thickness of the main wall (steel shield) has been calculated around ۱۲ cm to reduce the equivalent dose rate out of the furnace by about ۱۰ uSv/hr.

***Keywords**: Low and Intermediate Level Radioactive waste, treatment, thermal plasma technology, radiation shield.*

PACS No. ۲۸

مقدمه

سامانه‌های پیشرفته سوزاندن پسماند پرتوزا می‌توانند از پلاسما برای آمایش استفاده کنند، به این ترتیب خاکستر باقی‌مانده می‌تواند به صورت ماده‌ای شبه معدنی یا ماده مرکب شیشه‌ای ذوب گردد [۱]. منابع گرمایش پلاسما (مشعل پلاسما) دستگاه‌هایی هستند که جایگزین نازل‌های سوخت مایع یا مشعل‌های گاز هستند [۲]. آمایش پسماند جامد رادیواکتیو با استفاده از منابع گرمایش پلاسما

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

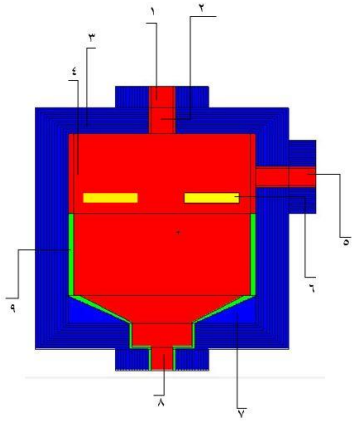
در محفظه‌های واکنش اولیه رخ می‌دهد. مراحل بعدی شامل تبدیل حرارتی مواد زائد با تشکیل سرباره مذاب معدنی، گازی‌سازی اجزای آلی، همگن سازی، ته نشینی سرباره ذوب شده و ریختن مواد مذاب در قالب‌های مخصوص است [۲]. در حال حاضر تعداد محدودی از نیروگاه‌ها در حال کار هستند که از فناوری پلاسمای حرارتی (TPT: Thermal plasma technology) به عنوان روشی برای آمایش پسماند رادیواکتیو استفاده می‌کنند، مانند RADON SIA در روسیه، ZWILAG در سوئیس، KOZLODUY در بلغارستان [۳].

با توجه به تقاضای قابل توجه برای آمایش پسماندهای رادیواکتیو، مطالعات بر روی پیکربندی‌های مختلف سیستم پلاسمایی ضروری است. از آنجا که تاکنون سامانه پلاسمایی آمایش و تثبیت پسماند پرتوزا در کشور مورد بررسی قرار نگرفته است، همچنین با توجه نیاز پژوهشکده پلاسما و گداخت هسته‌ای سازمان انرژی اتمی مبتنی بر نیاز داخل کشور، با الگوبرداری از طرح کوره ZWILAG، برای نخستین بار در کشور یک سیستم ترکیبی سوزاندن- شیشه‌سازی پلاسمایی در ابعاد آزمایشگاهی طراحی و ارائه شد، همچنین محاسبات شبیه‌سازی پرتوی محفظه فوق‌الذکر با استفاده از کد MCNP٦ مونت کارلو صورت پذیرفت [٤].

هندسه شبیه‌سازی شده و پیکربندی حفاظ

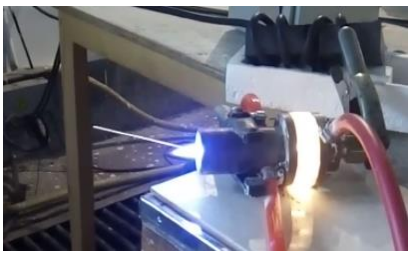
به منظور طراحی مفهومی سامانه در نخستین گام، تمامی سیستم‌های آمایش پلاسمایی موجود در دنیا که در مقیاس صنعتی به بهره‌برداری رسیده‌اند مورد مطالعه و بررسی قرار گرفت که طرح کوره ذوب ZWILAG سوئیس، به دلیل در دسترس بودن نسبی اطلاعات و ابعاد کوره، مبنای محاسبات و طراحی و البته اعتبارسنجی‌های بعدی قرار گرفت. بر اساس ابعاد مورد نظر در پژوهشکده و الزامات فضای مورد نظر، پیش‌فرض اولیه در این طراحی کاهش مقیاس کوره ZWILAG با نسبت ۱ به ٤ و رسیدن به ابعاد حدودی محفظه‌ی آزمایشگاهی است. با توجه به ابعاد اصلی پلاسمای ZWILAG (استوانه‌ای به قطر تقریبی ۳ و ارتفاع ٤ متر)، کوره آزمایشگاهی پیشنهادی به شعاع ۳٤ و ارتفاع ۱۰۰ سانتی‌متر در نظر گرفته شد [٥]. بر اساس فعالیت چشمه حجمی ($٤/٦ MBq/kg$)، هندسه‌ای به شکل استوانه‌های تو در تو با ترکیبی یکپارچه از جنس استنلس استیل ۳۱٦ به ضخامت ۱۲ سانتی‌متر که بر اساس ضخامت نیم‌برابر کننده فولاد و با استفاده از روش کاهش واریانس (تقسیم همراه با رولت روسی) به لایه‌های ۱ سانتی‌متری تقسیم شده‌اند، به عنوان حفاظ پرتوی در نظر گرفته شد [٦،٧].

راکتور پلاسمای پیشنهادی شامل یک محفظه ذوب است که نیمه بالایی آن به دیافراگم شارژ دسته‌ای و کانال ورودی خوراک پسماند متصل است و خوراک‌دهی به صورت عمودی و از بالا انجام می‌گیرد (شکل ۱)



شکل ۱: طرحواره سیستم ترکیبی سوزاندن و شیشه‌سازی پسماند پرتوزا با فناوری پلاسما، ۱- پسماند پرتوزا، ۲- درگاه خوراک دسته‌ای، ۳- حفاظ از جنس استنلس استیل ۳۱٦، ٤- محفظه احتراق، ٥- لوله خروج گاز، ٦- مشعل پلاسما، ۷- کفی شیب‌دار، ۸- خروجی سرباره، ۹- پوشش نسوز آلومینا.

بر اساس تجهیزات قابل دسترس و موجود در پژوهشکده، دیواره جانبی کوره مجهز به سه مشعل پلاسمای آرک انتقال‌نیافته با توان حدود $۳۰ kW$ و از نوع جریان مستقیم است که از جت پلاسمای حرارتی به منظور گرم‌کردن بوته مذاب استفاده می‌کند (شکل ۲). همچنین تصمیم بر آن شد تا مشعل‌های پلاسما در قسمت میانی کوره و با جهت محوری حدود ۰ درجه با بدنه شافت قرار گیرند.



شکل ۲: نمایی از مشعل پلاسمای ساخته شده در پژوهشکده فیزیک و پلاسما

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

علت این قرارگیری آن است که بیشترین بازدهی ذوب مواد ورودی در حجم موجود (که نسبت به طرح اصلی کاهش یافته) رخ دهد. کف بوته دارای یک مجرای خروجی به شکل یک کفی شیب‌دار به صورت دو مخروط ناقص تودرتو به منظور تخلیه‌ی سرباره مذاب است. همچنین از یک لایه پوشش نسوز از جنس اکسید آلومینیوم نیز در این طراحی بهره گرفته شده است.

لازم به ذکر است که محاسبات دزیمتری با استفاده از تالی F٤ و کارت‌های DE٤ و DF٤ به همراه Mesh Tally در کد MCNP٦ انجام شد [۸،۹،۱۰].

تعیین مشخصات چشمه پرتوی

یکی از مهم‌ترین بخش‌های محاسبات، محاسبه و بررسی رفتار پرتوزایی چشمه‌ی مورد نظر (فعالیت، پرتوهای گسیلی، شدت گسیل) در حین عبور از سیستم و ایمن بودن طراحی است. با توجه به مشابهت پسماند راکتور بوشهر به راکتور VVER روسیه، ترکیبات سوخت مشابه با این راکتور از ترکیب (Low and Intermediate Level Radioactive Waste) LILW (جدول ۱) در نظر گرفته شد. توزیع این ترکیب بالای مشعل‌های پلاسما در قسمت فوقانی کوره (قبل از ذوب شدن) با چگالی کم (معادل بخار) و در قسمت پایینی کوره با چگالی بالا (شیشه مذاب) در نظر گرفته شد [۱۱].

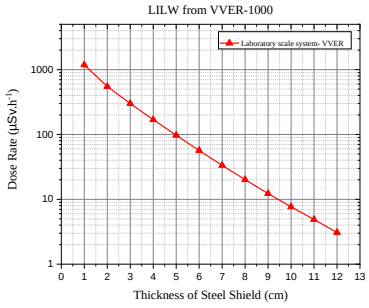
جدول ۱: مشخصات ترکیبات اصلی پسماند مایع LILW [۱۱]

مشخصات ترکیب LILW	Tver NPP
غلظت کل نمک‌ها (kg/m^3)	۳۵۰-۵۰۰
غلظت نمک‌های محلول (kg/m^3)	۳۵۰-۵۰۰
غلظت مواد نامحلول (kg/m^3)	<۵
چگالی (kg/dm^3)	۱/۲-۱/۵
pH	۱۰/۵
فازهای کریستالی	$NaNO_3$ $NaB(OH)_4$ NaOH
هسته‌های پرتوزا	**فعالیت (Bq/Kg glass)**
Cs-۱۳۷	۳ × ۱۰^۶
Cs-۱۳٤	۱/۶ × ۱۰^۶
Sr-۹۰	۱/۶ × ۱۰^۴
Co-٦۰	۷/۶ × ۱۰^۴
گسیلنده‌های α	۱/۶ × ۱۰^۲

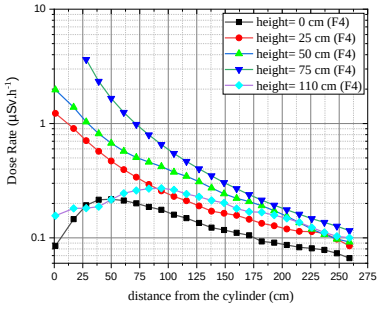
غلظت و فعالیت هر کدام از هسته‌های گامازای ترکیب LILW محاسبه شدند. سپس با توجه به توزیع جرمی پسماند ورودی در داخل محفظه و دبی ورود پسماند، نحوه توزیع فضایی میزان آهنگ دز در خارج از کوره مورد ارزیابی قرار گرفت تا کارآمد بودن طراحی و حفاظ پیشنهاد شده، تایید شود [۱۲].

تجزیه و تحلیل نتایج حاصل از شبیه‌سازی

به منظور تخمین ضخامت بهینه برای حفاظ، روند تغییرات آهنگ دز ناشی از پرتوهای گامای گسیلی از چشمه (جدول ۱)، در داخل لایه‌های حفاظ اصلی و نیز اطراف کوره مورد ارزیابی قرار گرفت تا ضخامت حفاظ به گونه‌ای باشد که میزان آهنگ دز رسیده در پشت آن به حد مجاز $10\ \mu Sv/h$ برسد (شکل ۳ و ٤).



شکل ۳: آهنگ دز معادل در لایه‌های حفاظ استوانه‌ای به شعاع ۳٤ و ارتفاع ۱۰۰ سانتی‌متر از جنس استنلس استیل ۳۱٦



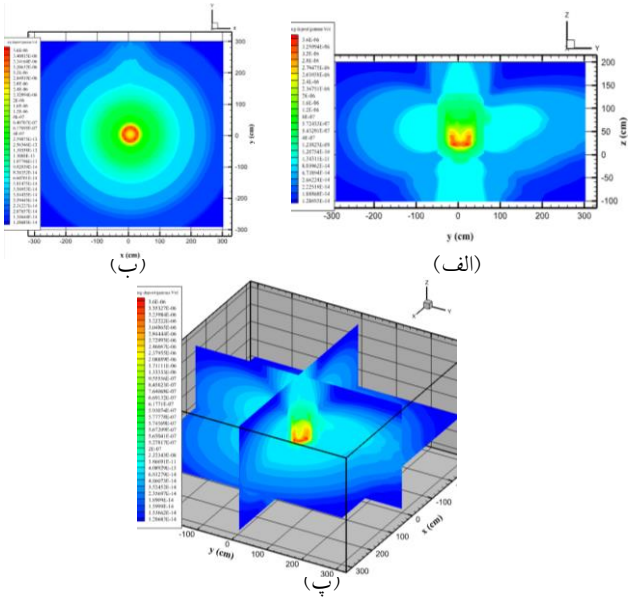
شکل ٤: تغییرات آهنگ دز معادل بر حسب فواصل مختلف از کوره استوانه‌ای به شعاع ۳٤ و ارتفاع ۱۰۰ سانتی‌متر از جنس استنلس استیل ۳۱٦

مطابق شکل ٤ با دور شدن از حفاظ (چشمه) روند تغییرات آهنگ دز نزولی است. تغییرات دز در ارتفاع‌های مختلف نیز دیده می‌شود که دلیل آن توزیع ناهمگن پسماند پرتوزا داخل کوره است.

همچنین میزان آهنگ دز معادل پشت حفاظ کمتر از $10\ \mu Sv/h$

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

است، لذا کار با حفظ فاصله در اطراف کوره از نظر پرتوی محیط ایمن است چنانچه میزان آهنگ دز دریافتی در فاصله‌ی حدودا ۲/۵ متری از سیستم به کمتر از $1\ \mu Sv/h$ خواهد رسید. لازم به ذکر است تمامی محاسبات با خطای نسبی کمتر از ۵ درصد گزارش شده است. علاوه بر این به منظور درک بهتر چگونگی توزیع انرژی در داخل و اطراف کوره‌ها، شبیه‌سازی‌ها به کمک مش‌تالی انجام گرفت (شکل۵) .رنگ قرمز و آبی به ترتیب بیشینه و کمینه انرژی به جای مانده را نشان می‌دهد. بررسی کانتورهای مش‌تالی مربوط به سیستم پیشنهادی حاکی از آن است که انرژی به جای مانده در واحد حجم به ازای هر فوتون به گونه‌ای است که بیشترین انرژی در داخل کوره بخش مذاب که حاوی غلظت بالاتری از مواد پرتوزا می‌باشد، ذخیره شده و با دور شدن از محفظه مقدار آن به تدریج کاهش می‌یابد.



شکل ۵: نحوه توزیع انرژی در اطراف کوره با استفاده از مش تالی؛ (الف) برش طولی محفظه، (ب) برش عرضی، (پ) نمای سه بعدی

نتیجه گیری

کوره طراحی شده برای آمایش پسماند رادیواکتیو VVER روسیه مبتنی بر طرح اصلی ZWILAG با تغییر در جانمایی مشعل‌های پلاسما و جهت قرارگیری آنها، همچنین محاسبات مربوط به دیواره اصلی بدنه کوره به عنوان حفاظ پرتوی مورد بررسی قرار گرفت. لازم به ذکر است به منظور اعتبارسنجی اولیه، نتایج کار با نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های صورت گرفته برای کوره ZWILAG مقایسه گردید. چگونگی افت دز ناشی از گاماهای گسیل شده از چشمه و تضعیف آن‌ها در اثر عبور از ضخامت‌های مختلف فولاد نشان می‌دهد که ضخامت ۱۲cm از فولاد کافی است تا میزان دز در پشت حفاظ به کمتر از $10\ \mu Sv/h$ برسد. همانگونه که انتظار می‌رفت، با دور شدن از چشمه در فواصل مختلف روند تغییرات آهنگ دز سیر نزولی دارد به طوری‌که آهنگ دز در فاصله حدودا ۲/۵ متری از کوره به کمتر از $1\ \mu Sv/h$ می‌رسد. به طور کلی می‌توان نتیجه گرفت که سیستم پیشنهادی برای پسماند LILW کارامد است.

مرجع‌ها

[۱] میشل آی. اوجووان، ویلیام. ای. لی، " مقدمه‌ای بر تثبیت پسماند هسته‌ای"، ترجمه م. فریبرز ریاحی. انتشارات پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، تهران، ۱۳۹۲

[۲] IAEA, I. (۲۰۰۶). TECDOC-۱۵۲۷, *Application of Thermal Technologies for Processing of Radioactive Waste*. IAEA-TECDOC-۱۵۲۷. ۲۰۰۶, Austria, Vienna: INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY

[۳] Deckers, J., *Incineration and plasma processes and technology for treatment and conditioning of radioactive waste*, (۲۰۱۱).

[٤] C.J. Werner, J.S. Bull, C.J. Solomon, et al., *MCNP٦,٢ Release Notes*, LA-UR-۱۸-۲۰۸۰۸, (۲۰۱۸).

[٥] Prado, E. S., Miranda, F. S., de Araujo, L. G., Petraconi, G., & Baldan, M. R. (۲۰۲۰). *Thermal plasma technology for radioactive waste treatment: a review*. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, ۳۲٥(۲), ۳۳۱-۳٤۲.

[٦] Dunn, W. L., & Shultis, J. K. (۲۰۱۱), *Exploring monte carlo methods*, Elsevier.

[۷] Chilton, A. B., Shultis, J. K., & Faw, R. E. (۱۹۸٤). *Principles of radiation shielding*.

[۸] Werner, C. J., Bull, J. S., Solomon, C. J., Brown, F. B., McKinney, G. W., Rising, M. E., ... & Zukaitis, A. (۲۰۱۸). *MCNP٦. ٢ Release Notes-report LA-UR-۱۸-۲۰۸۰۸. Los Alamos National Laboratory*, ٤۳.

[۹] https://www.nist.gov

[۱۰] Seltzer, S. M. (۱۹۹۳). *Calculation of photon mass energy-transfer and mass energy-absorption coefficients. Radiation research*, ۱۳٦(۲), ۱٤۷-۱۷۰.

[۱۱] Laverov, N. P., Omel'Yanenko, B. I., Yudintsev, S. V., Stefanovsky, S. V., & Nikonov, B. S. (۲۰۱۳). Glasses for immobilization of low-and intermediate-level radioactive waste. Geology of Ore Deposits, ٥٥(۲), ۷۱

[۱۲] Bé, M. M., Chisté, V., Dulieu, C., Browne, E., & Dersch, R. (۲۰۰٤). Monographie BIPM-٥—Table of Radionuclides, Vol. ٤. Internet: http://www. nucleide. org.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

اثرات غیرموضعی روی فرکانس‌های پلاسمون‌های سطحی پوسته کروی نانو فلزی

مسلم میر

گروه فیزیک، دانشگاه زابل ، زابل

چکیده

یک پوسته کروی نانو فلزی را در نظر بگیرید، در این اینجا با استفاده از مدل هیدرودینامیکی دورود اثرات غیر موضعی را روی پلاسمون‌های سطحی آن بررسی می‌کنیم. با استفاده از مدل هیدرودینامیکی دورود دو معادله جفت شده برای فرکانس‌های پلاسمون سطحی پوسته کروی نانو به دست آوردیم ، با استفاده از این معادلات برای هر ضخامت پوسته کروی نانو دو فرکانس پلاسمون می‌آید که با کاهش ضخامت اختلاف این دو فرکانس افزایش می‌یابد. فرکانس‌های پلاسمون سطحی به دست آمده از روش هیدرودینامیک دورود با فرکانس‌های حد موضعی تفاوت دارد.

واژه های کلیدی: *اثرات غیر موضعی، پلاسمون‌های سطحی، پوسته‌های کروی نانو فلزی*

Non-local effects on Surface Plasmons Frequencies in Metallic Nanoshell

Mir, Moslem

Department of Physics, University of Zabol (UOZ), Zabol 98615-538

Abstract

Consider a metallic nanoshell. Using the Drude hydrodynamical model, we investigate the non-local effects on the surface plasmons of nanoshells. Using the Drude hydrodynamic model, we obtained two coupled equations for the surface plasmon frequencies of the nanoshell. Using these equations, two plasmon frequencies are calculated for each thickness of the nanoshell, which increase with decreasing thickness. The surface plasmon frequencies obtained from the hydrodynamic Drude mosdel differ from the local limit frequencies.

Keywords: *Non-local effects, Surface plasmons, Metallic Nanoshell*

PACS NO. 78

مقدمه

پلاسمون‌ها حرکت‌های دسته جمعی الکترون‌ها هستند که در حجم و سطح فلزات برانگیخته می‌شوند. پلاسمون‌های سطحی در فرکانس‌های بالاتری نسبت پلاسمون‌های حجمی برانگیخته می‌شوند، که می‌تواند در قطعات الکترونیکی پلاسمونیکی مورد استفاده قرار گیرد. فرکانس‌های برانگیختگی پلاسمون‌ها در نانوساختار در محدود تراهرتز است، نانوکره‌های، نانوپوسته‌های کروی و نانوحفرها از جمله نانوساختارهایی هستند که در فرکانس‌های بالا برانگیخته شده و پتانسیل استفاده در قطعات الکترونیکی جدید را دارند[1,2]. در نانوساختارها اثرات غیرموضعی در محدوده فرکانس‌های بالا اهمیت دارند، اثرات غیرموضعی در نانوساختارها را با استفاده از روش‌های SRM و هیدرودینامیکی دورود بررسی می‌کنند[3]، در این اینجا با استفاده از روش هیدرودینامیکی دورود فرکانس‌های پلاسمون‌های سطحی یک پوسته کروی نانو فلزی را که در خلأ قرار دارد محاسبه می‌کنیم، برای هر ضخامت دو فرکانس پلاسمون سطحی به دست می‌آید که اختلاف آن‌ها با کاهش ضخامت بیشتر می‌شود. رابطه فرکانس‌های پلاسمون‌های سطحی را در حد موضعی به دست آوردیم. فرکانس‌های پلاسمون‌های سطحی به دست آمده با استفاده از روش هیدرودینامیکی دورود با فرکانس‌های حد موضعی تفاوت دارند و این تفاوت برای ضخامت‌های کمتر بیشتر است، چون اثرات غیر موضعی در ضخامت‌های کمتر بیشتر خود را نشان می‌دهند.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مدل هیدرودینامیکی دورود

در فلزات دریایی از الکترون‌های آزاد در شناور هستند و با هسته‌ها و ناخالصی‌ها برخورد می‌کنند، در مدل هیدرودینامیکی الکترون‌های فلز را به صورت یک مایع باردار نیمه کلاسیکی در نظر می‌گیرند که در حضور هسته‌های مثبت حرکت می‌کنند، دینامیک این سیستم را می‌توان توسط مدل هیدرودینامیکی بلوخ بررسی کنیم. مدل هیدرودینامیکی بلوخ با حل هم‌زمان معادلات زیر حرکت الکترون‌ها را بررسی می‌کند

معادله نویر–استوکس،

$$m_e n\left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t}+(\vec{v}.\vec{\nabla})\vec{v}\right) = -\vec{\nabla}P(n) - ne\vec{E} - m_e n\,\Gamma\,\vec{v} \quad (1)$$

معادله پیوستگی

$$\frac{\partial n}{\partial t}+\vec{\nabla}.(n\vec{v})=0 \quad (2)$$

معادله پواسون

$$\vec{\nabla}.\vec{E} = -4\pi e(n-n_0) \quad (3)$$

که m_e جرم الکترون، $n(\vec{r},t)$ چگالی حجمی الکترون‌ها، n_0 چگالی حجمی یون‌ها (چگالی حجمی تعادلی الکترون‌ها)، $\vec{v}(\vec{r},t)$ سرعت الکترون‌ها، $P(n)$ فشار گاز الکترونی ناشی از اصل طرد پائولی و Γ پارامتر میرائی است. در مدل هیدرودینامیکی جمله $\vec{\nabla}P(n) = m_e\beta^2\vec{\nabla}n$ نشان دهنده اثر غیرموضعی فضایی است که $\beta^2 = (3/5)v_F^2$ (v_F سرعت فرمی الکترون‌ها) است.

معادلات جفت شده (1) تا (3) را در رژیم شبه استاتیک $\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi$ و برای اختلات کوچک نوسانی نزدیک تعادل حل کنیم. با در نظر گرفتن اختلات، چگالی، سرعت و پتانسیل را به صورت زیر می‌نویسیم،

$$\begin{aligned} n(\vec{r},t) &= n_0 + \delta n^{(1)}(\vec{r})e^{-i(\omega+i\omega_I)t} \\ \vec{v}(\vec{r},t) &= \vec{v}^{(1)}(\vec{r})e^{-i(\omega+i\omega_I)t} \\ \phi(\vec{r},t) &= \phi^{(1)}(\vec{r})e^{-i(\omega+i\omega_I)t} \end{aligned} \quad (4)$$

که ω و ω_I قسمت‌های حقیقی و موهومی فرکانس است. با جایگذاری معادلات (4) در معادلات (1) تا (3) و نگه داشتن جملات تا مرتبه خطی، معادلات زیر به دست می‌آید،

$$m_e n\frac{\partial \vec{v}^{(1)}}{\partial t} = -\vec{\nabla}P(n) + n_0 e\vec{\nabla}\phi^{(1)} - m_e n_0\,\Gamma\vec{v}^{(1)} \quad (5)$$

$$\frac{\partial \delta n^{(1)}}{\partial t} + n_0\vec{\nabla}.\vec{v}^{(1)} = 0 \quad (6)$$

$$\nabla^2\phi = -4\pi e\delta n^{(1)} \quad (7)$$

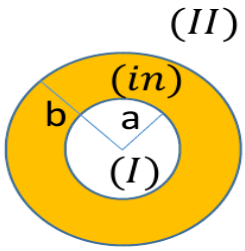
از دو طرف معادله (5) دیورژانس گرفته، سپس معادله‌های (6) و (7) را در آن جایگذاری می‌کنیم، که از قسمت حقیقی آن، معادله دیفرانسیل نهایی حاکم بر چگالی الکترونی به‌دست می‌آید،

$$(\nabla^2 - q^2)\delta n^{(1)}(r) = 0 \quad (8)$$

با $q^2 = \left(\omega_p^2 - \omega^2 - \Gamma^2/4\right)/\beta^2$، که فرکانس پلاسمای سیستم $\omega_p^2 = 4\pi\, n_0 e^2/m$ است.

از قسمت موهومی معادله نهایی $\omega_I = -\Gamma/2$، به دست می‌آید.

از حل معادله (8) برای $\omega > \sqrt{\omega_p^2 - \Gamma^2/4}$، فرکانس‌های پلاسمون سطحی و برای $\omega < \sqrt{\omega_p^2 - \Gamma^2/4}$، فرکانس‌های پلاسمون حجمی به دست می‌آید.



شکل 1. پوسته کروی نانو فلزی که در خلأ قرار دارد. فضای داخل پوسته خلأ است.

مدل هیدرودینامیکی دورود برای پوسته کروی فلزی نانو

یک پوسته کروی فلزی نانو مطابق شکل 1 را که شعاع داخلی آن a و شعاع بیرونی آن b است، در نظر بگیرید. از حل معادله (8) رابطه زیر برای چگالی الکترونی آن به دست می‌آید،

$$\delta n^{(1)}(r,\theta,\varphi,t) = \begin{cases} 0 & r<a \\ \sum_{l,m} A_{lm}\, i_l(qr) + B_{l,m}\, k_l(qr)\, y_{l,m}(\theta,\varphi)e^{-i\,\omega\, t} & ,\ a<r<b \\ 0 & ,\quad r>b \end{cases} \quad (9)$$

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

که A_{lm} و $B_{l,m}$ ضرایب ثابت و $i_l(qr)$ و $k_l(qr)$ به ترتیب توابع بسل کروی اصلاح شده نوع اول و دوم هستند. در ادامه پتانسیل الکتریکی را در سه ناحیه مربوط به پوسته کروی نانو به دست می‌آوریم. برای به‌دست آوردن پتانسیل در محیط فلزی پوسته کروی نانو، چگالی الکترونی $\delta n^{(1)}$ را از معادله (7) در معادله (8) جایگذاری می‌کنیم،

$$(\nabla^2 - q^2)\nabla^2\phi_{in}(r,\theta,\varphi,t) = 0 \qquad (10)$$

با حل معادله بالا رابطه زیر برای پتانسیل در خارج از نانو حفره به دست می‌آید،

$$\phi_{in}(r,\theta,\varphi,t) = \qquad (11)$$
$$\sum_{l,m}\left(A'_{lm}i_l(qr) + B'_{lm}k_l(qr) + C_{l,m}\,r^l + D_{l,m}\,r^{-(l+1)}\right)\,y_{l,m}(\theta,\varphi)e^{-i\omega t}$$

برای محاسبه پتانسیل در ناحیه $r < a$ و بیرون پوسته کروی نانو ($r > b$) معادله لاپلاس را در این دو ناحیه حل می‌کنیم، با حل معادله لاپلاس روابط زیر برای پتانسیل در این دو ناحیه به دست می‌آید،

$$\phi_I(r,\theta,\varphi,t) = \sum_{l,m} F_{l,m}\,r^l\,y_{l,m}(\theta,\varphi) \qquad (12)$$

$$\phi_{II}(r,\theta,\varphi,t) = \sum_{l,m} E_{l,m}\,\frac{1}{r^{l+1}}\,y_{l,m}(\theta,\varphi) \qquad (13)$$

ناحیه‌های I و II را خلأ در نظر می‌گیریم. برای به دست آوردن ضرایب پتانسیل‌های سه ناحیه پوسته کروی نانو شرط‌های مرزی پیوستگی پتانسیل و بردار جابجایی را در سطح‌های داخلی و خارجی پوسته کروی نانو اعمال می‌کنیم، سپس با اعمال شرط صفر شدن مؤلفه شعای چگالی روی سطح‌های داخلی و خارجی پوسته کروی نانو رابطه‌های زیر به دست می‌آید،

$$j_r|_{r=r_i} = 0 \rightarrow v_r|_{r=r_i} = 0, r_i = a, b$$

$$\begin{bmatrix}(\omega_p^2 - \beta^2k^2)(kb)i'_l(qb)\\ +\omega_p^2\left(l\,b\,s1 - (l+1)b^{-(l+1)}s2\right)\end{bmatrix}A_{lm} \quad (14)$$
$$+\begin{bmatrix}(\omega_p^2 - \beta^2k^2)(kb)k'_l(qb)\\ +\omega_p^2\left(l\,b\,p1 - (l+1)b^{-(l+1)}p2\right)\end{bmatrix}B_{lm} = 0$$

$$\begin{bmatrix}(\omega_p^2 - \beta^2k^2)(ka)\,i'_l(qa)\\ +\omega_p^2\left(l\,a\,s1 - (l+1)a^{-(l+1)}s2\right)\end{bmatrix}A_{lm} \quad (15)$$
$$+\begin{bmatrix}(\omega_p^2 - \beta^2k^2)(ka)k'_l(qa)\\ +\omega_p^2\left(l\,a\,p1 - (l+1)a^{-(l+1)}p2\right)\end{bmatrix}B_{lm} = 0$$

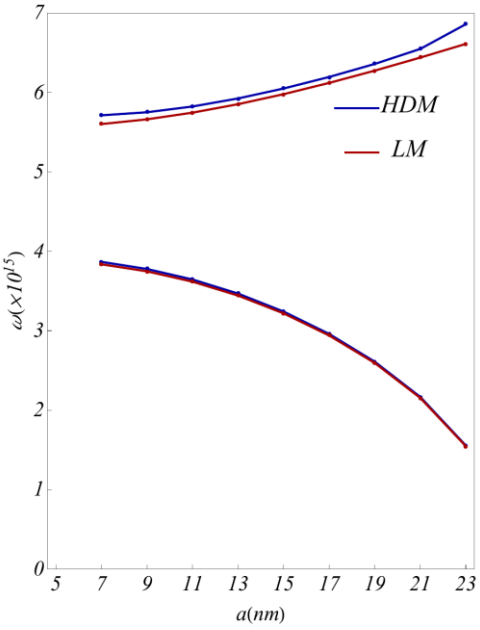
با حل معادلات با فرکانس‌های پلاسمون سطحی پوسته کروی نانو به دست می‌آید. اگر میرایی را صفر در نظر بگیریم، در حد $\beta \rightarrow 0$ رابطه زیر برای فرکانس‌های پلاسمونی پوسته کروی نانو به دست می‌آید[4]

$$\omega_{l\pm}^2 = \frac{\omega_p^2}{2}\left[1 \pm \frac{1}{2l+1}\sqrt{1 + 4l(l+1)\left(\frac{a}{b}\right)^{2l+1}}\right] \quad (16)$$

در شکل2 فرکانس‌های پلاسمون سطحی پوسته کروی نانو را بر حسب ضخامت‌های مختلف رسم شده است، برای هر ضخامت دو فرکانس پلاسمون وجود دارد که با کاهش ضخامت اختلاف بین این فرکانس‌ها افزایش می‌یابد. همچنین از شکل2 مشاهده می‌کنیم که با کاهش ضخامت تفاوت بین فرکانس‌های پلاسمون‌های به دست آمده از روش هیدرودینامیکی با فرکانس‌های حد موضعی افزایش می‌یابد.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

[4] Maier, S.A. (2007) Plasmonics: Fundamentals and Applications, Springer, Berlin.



شکل 1. فرکانسهای پلاسمون‌های سطحی پوسته کروی نانو بر حسب افزایش شعاع داخلی آن (کاهش ضخامت).

نتیجه‌گیری

یک پوسته کروی نانو فلزی را در نظر گرفتیم. با استفاده از مدل هیدرودینامیکی دورود اثرات غیر موضعی را روی پلاسمون‌های سطحی آن بررسی کردیم. دو معادله جفت شده به دست آوردیم که با استفاده از آن‌ها برای هر ضخامت دو فرکانس پلاسمونی محاسبه کردیم. مشاهده کردیم که با کاهش ضخامت پوسته کروی نانو اختلاف این دو فرکانس افزایش می‌یابد. با مقایسه فرکانس‌های به دست آمده از روش هیدرودینامیکی دورود با فرکانس‌های حد موضعی یک تفاوت جزئی بین آن‌ها مشاهده می‌شود که این تفاوت با کاهش ضخامت بیشتر می‌شود.

مرجع ها

[1] V. G. Kravets, A. V. Kabashin, W. L. Barnes, and A. N. Grigorenko, Chem. Rev. 118, 5912 (2018).
[2] T. J. Davis, D. E. G_omez and A. Roberts, Nanophotonics ,6, 543 (2017).
[3] C. David and F. J. Garc__a de Abajo, J. Phys. Chem. C,115, 19470 (2011).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مطالعه‌ی ابتدابه‌ساکن خواص الکترونی و اپتیکی استنین در حضور ناخالصی های همزمان بور و نیتروژن

ایزدیان، اکرم؛ نجاتی‌پور، ریحان؛ دادستانی مهرداد

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه لرستان، خرم آباد، لرستان، ایران

چکیده

در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی و با استفاده از روش امواج به‌ساخته‌ی خطی و پتانسیل کامل (FPLAPW) و تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA) خواص الکترونی و اپتیکی استنین آلایش‌شده با اتم‌های بور و نیتروژن مطالعه می‌شود. اگرچه استنین ساختاری بدون گاف نواری است، در حضور هم‌زمان ناخالصی‌های بور و نیتروژن به یک نیم‌رسانا با گاف نواری ۰/۱٤ eV تبدیل می‌شود. تغییر در خواص الکترونی استنین در حضور ناخالصی، منجر به تغییر در پاسخ اپتیکی آن می‌گردد. علاوه بر کاهش ثابت دی‌الکتریک، منشأ انتقالات الکترونی در ساختار خالص از حالات s و p اتم قلع به p اتم‌های نیتروژن و بور در ساختار ناخالص تغییر می‌کند.

واژه های کلیدی: *استنین، ساختار الکترونی، خواص اپتیکی، آلایش هم‌زمان با بور و نیتروژن، نظریه تابعی چگالی (DFT).*

Ab initio study of the electronic and optical properties of the boron and nitrogen co-doped stanene

Izadian, Akram; Nejatipour, Reihan; Dadsetani, Mehrdad

Department of Physics, Faculty of Sciences, Lorestan University, Khoramabad, Lorestan, Iran

Abstract

In the framework of the density functional theory and using the full potential linearized augmented plane wave method and the generalized gradient approximation (GGA), the electronic and optical properties of boron and nitrogen co-doped stanene are investigated. Although stanene is a zero band gap structure, in the presence of the boron and nitrogen co-doping, it is changed to a semiconductor with a 0.14 eV band gap. The change in the electronic properties of stanene in the presence of impurity leads to the change in its optical properties. In addition to the decrease in dielectric constant, the origin of the electron transitions in the pure structure changes from s and p states of Sn atom to the p states of nitrogen and boron in the co-doped structure.

***Keywords**: Stanene, Electronic structure, Optical properties, Boron and nitrogen co-doping, Density functional theory (DFT)*

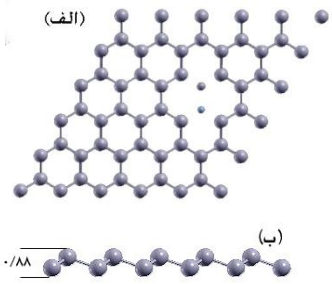
PACS No. 42, 73, 78

مقدمه

استنین تک‌لایه‌ای گرافین‌گونه و فلزی است که در دمای اتاق یک عایق توپولوژیک و همزمان یک ابررسانای توپولوژیک با اتلاف انرژی تقریبا صفر می باشد [۱]. این لایه‌ی دو بعدی دارای خواص الکترونی، فوتونی و اسپینترونیکی غیر متعارفی است که امکان ذخیره و تبدیل انرژی‌ها را دارا، و در حسگرها، کامپوزیت‌ها و صنایع پزشکی قابل استفاده است. استنین بدون در نظر گرفتن اثر جفت‌شدگی‌های اسپین‌مدار ترکیبی بدون گاف نواری است، ولی با احتساب آن، دارای گاف الکترونی در حدود ۰/۱ eV است [۲]. گاف نواری غیرمعمول، کاربرد دستگاه کوانتومی در دمای اتاق را امکان‌پذیر می‌کند. نانوصفحات مستقل از بستر استنین که از طریق لایه برداری ایجاد می‌شوند کابردهای وسیعی در آینده صنعت

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

خواهند داشت. مدل‌های محاسباتی مختلف و پیش‌بینی‌های نظری، ویژگی‌های بنیادی قابل تنظیم و منحصر بفرد استنین را بررسی و کارآمدی آن راتایید کرده‌اند. وانگ و همکارانش دریافتند که تزریق ناخالصی‌های مختلفی مانند بور و نیتروژن باعث ایجاد گاف الکترونی قابل تنظیم در استنین می‌شود که در تنظیم خواص الکترونی آن بسیار موثر است [۳]. تزریق اتم‌های نیتروژن (N) و بور (B) با الگوها و غلظت های مختلفی به گرافین، خواص الکترونی آن ها را تحت تاثیر قرار داده است. مطالعات اخیر نشان می‌دهد که با این نوع تزریق به لایه استنین نیز می توان خواص الکترونی آن را تحت تاثیر قرار داد [۱]. در این پژوهش، ابتدا تغییرات خواص الکترونی و در ادامه خواص اپتیکی استنین آلایش شده با بور و نیتروژن مورد مطالعه قرار می‌گیرد.



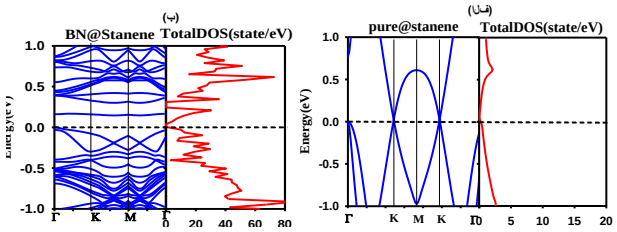
شکل ۱: الف) نمای روبروی استنین ناخالص‌شده با اتم‌های بور (سبز) و نیتروژن (آبی)، (ب) نمای جانبی در الف.

روش محاسبات

پژوهش حاضر با استفاده از بسته‌ی محاسباتی WIEN2k و روش موج‌تخت بهساخته‌ی خطی با پتانسیل کامل انجام شد. انرژی تبادلی‌همبستگی از تقریب شیب تعمیم یافته با تابعی پردو و همکاران (GGA-PBE) محاسبه گردید. برای حذف برهم‌کنش اتم‌های ناخالصی در یاخته های مجاور، ابریاخته‌ای با ابعاد ۱×۵×۵ و برای حذف برهم‌کنش ایه‌های مجاور، طول خلاء ۲۰Å لحاظ شد. محاسبات خودسازگار با $RK_{max}=7$ و ابعاد فضای وارون k، ۱×۴×۴ لحاظ گردید. در محاسبات اپتیکی، بخش موهومی تابع دی‌الکتریک $\varepsilon_2(\omega)$ و به تبع آن سایر پارامترهای اپتیکی از تقریب فاز کاتوره‌ای (RPA) محاسبه گردید.

نتایج و بحث

استنین لایه‌ای دو بعدی از اتم‌های قلع با پایه‌ی دو اتمی، با ساختاری شش گوشه و لانه‌زنبوری است. بین اتم‌های مجاور پیوند π-π برقرار است و یک ساختار چین‌خورده را تشکیل داده‌اند. سطح استنین برخلاف گرافین مواج است؛ میزان خمیدگی این سطح ۰/۸۸ آنگستروم (شکل ۱)، و در تطابق با نتایج مطالعات دیگران می‌باشد [۴,۱]. پارامترهای شبکه‌ی استنین $a=b=$ ۴/۵۴ و طول پیوند Sn-Sn، ۲/۷۸ آنگستروم است. تزریق همزمان یک اتم بور و یک اتم نیتروژن به یک لایه پنجاه اتمی از اتم های قلع یک ابریاخته با ناخالصی ۴٪ ایجاد می کند، و موجب ایجاد زوج الکترون و حفره می‌گردد. با تزریق ناخالصی تقارن‌ها در شبکه‌ی استنین شکسته می‌شود و خواص الکترونی لایه تحت تاثیر قرار می‌گیرد. الگویی که برای تزریق ناخالصی استفاده شده به گونه ای است که N و B مجاور هم قرار گرفته‌اند. در این حالت فاصله بین این دو ۲/۷۷ آنگستروم است، حال آنکه در بورنیتراید طول پیوند ۱/۴۵ انگستروم می‌باشد. این اختلاف خود گواهی بر تغییرات خواص الکترونی استنین آلایش‌شده است.



شکل ۲: ساختار نواری و چگالی حالتها در (الف)استنین خالص و(ب)آلایش شده.

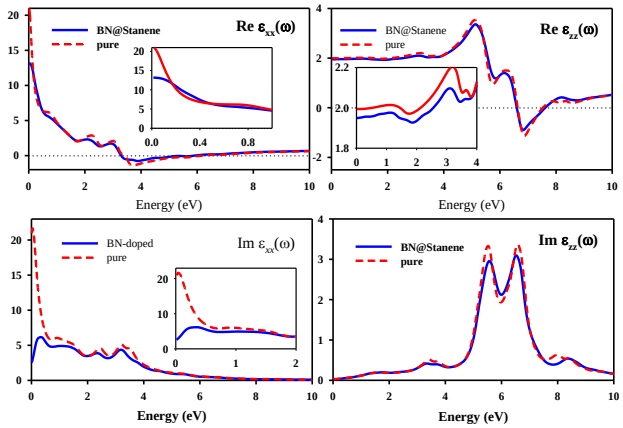
در شکل ۲ چگالی حالت‌ها و ساختار نواری استنین آلایش‌شده و استنین خالص مقایسه می‌شود. با اینکه استنین خالص ترکیبی بدون گاف نواری و دارای مخروطی دیراک مانند در نقطه K است، ایجاد گاف در استنین آلایش‌شده کاملاً مشهود است؛ در تقریب GGA-PBE و بدون در نظر گرفتن اثر اسپین‌مدار گافی به میزان ۰/۱۴ eV درساختار نواری ماده ایجاد شده است، که مطابق با گزارشات دیگران است [۲]. همانطور که از ساختار نواری پیداست، حضور ناخالصی گاف را از نقطه K به نقطه M تغییر داده است. از آنجایی که فاصله‌ی بین اتمهای B و N در این ساختار از مورد متناظر در ساختار

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بورنیتراید بیشتر است، پس بین این دو اتم پیوند کوالانسی برقرار نشده است. هر دو اتم ناخالصی از اتم قلع بار منفی می‌گیرند و یکدیگر را دفع می‌کنند. این امر منجر به ایجاد گاف نواری در ترکیب ناخالص می‌گردد.

در ادامه به مطالعه‌ی خواص اپتیکی ترکیب استنین در حضور ناخالصی‌های همزمان بور و نیتروژن می‌پردازیم. همانگونه که در شکل‌های ۳ تا ٦ پیداست، پاسخ محیط نسبت به پرتوهای ورودی در دو راستای عمود و موازی با سطح لایه متفاوت، و بنابراین محیط ناهمسانگرد است. قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک در انرژی صفر ثابت دی‌الکتریک ماده است، که برای مؤلفه‌ی xx در ماده خالص ١٦/٥٥ و برای ماده ناخالص این مقدار ١٣/٨٠ است (شکل٣). قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک در ماده خالص به ازای انرژی‌های ٣/٢٦ و ٦/٠٤ eV، و ماده ناخالص به ازای انرژی‌های ٣/٢٩ و eV ٥/٩٠ صفر است. مقادیر منفی قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک نشان از رفتار فلزی ماده است. بنابراین در بازه‌های انرژی مذکور، بازتاب کامل است، و هر دو ترکیب رفتار فلزی دارند. از شکل ٣ پیداست که برای مؤلفه‌ی zz رفتار فلزی ساختار دو ماده خالص و ناخالص در بازه‌ی ٦/٦٥ تا ٧/٥٥، و متفاوت از مؤلفه‌ی xx است. در تابش عمودی، برای انرژی‌های نزدیک به صفر تفاوت رفتاری از ماده خالص به ناخالص اندک است و ثابت دی الکتریک هر دو ماده خالص و ناخالص اختلاف ناچیزی دارد.

بیشینه‌ها در بخش موهومی تابع دی‌الکتریک گذارهای بین‌نواری را تعیین می کنند. در هر دو جهت تابش، ٤ قله یا شانه وجود دارد. که انتقال الکترون ها از اربیتال های ترازهای ظرفیت به اربیتال های ترازهای رسانش را نشان می‌دهد. بیشینه‌ها در ماده خالص از بیشینه‌ها در ماده ناخالص بلندتر هستند، و این به‌معنای جذب کمتر در فرکانس‌های تابشی یکسان در ساختار ناخالص است، یا به‌عبارتی، ماده خالص دارای خاصیت فلزی قویتر است. مقدار $\varepsilon_2(\omega)$ در انرژی صفر برای مؤلفه‌ی xx در ساختار خالص بسیار بیشتر از ساختار ناخالص، و این تأییدی بر گاف ایجاد شده در ساختار نواری ساختار ناخالص است. در راستای x (z)، هر دو ماده خالص و ناخالص در محدوده امواج مرئی (فرابنفش) جذب انرژی دارند. بیشینه‌ها در قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک برای مؤلفه‌ی x ساختار خالص (ناخالص) در انرژی‌های ٠/٨، ١/٣١ و ٣/٢٢ eV (٠/٢٩، ١/٢٩، و ٣/١٩ eV) رخ می‌دهد که متناظر است با انتقالات از حالات s و p اتم قلع (p اتم‌های نیتروژن و بور) به d قلع (s اتم‌های نیتروژن و بور و d اتم قلع). منشأ بیشینه‌های $\varepsilon_2(\omega)$ در ٥/٥٣ و ٦/٥٥ برای پاسخ zz، در ساختار خالص (ناخالص) مشابه پاسخ xx است.

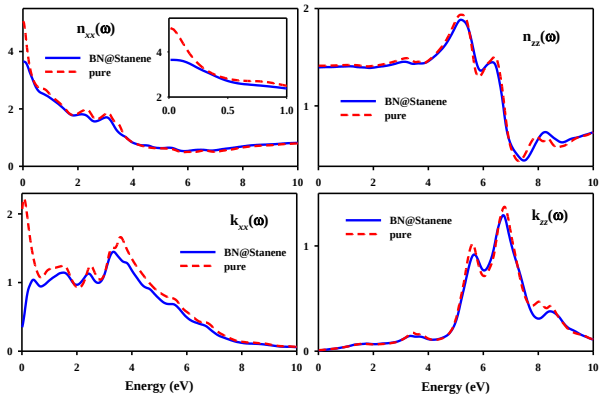


شکل٣: قسمت‌های حقیقی (بالا) و موهومی (پایین) تابع دی‌الکتریک برای ساختارهای استنین (خط‌چین) و ناخالص (خط پر).

ضریب شکست نحوه‌ی انتشار نور را در محیط مشخص می‌کند. مطابق با شکل ٤، ضریب شکست برای استنین خالص و آلایش شده، دوگانه و بنابراین، محیط ناهمسانگرد است. برای مؤلفه‌ی x، ضریب شکست استاتیک، که مقدار ضریب شکست به‌ازای انرژی صفر است، برای استنین خالص ٥/٠٦ و برای استنین آلایش شده ٣/٦٤ است. این اختلاف برای تابش در جهت عمود به سطح بسیار کمتر است. ضمن اینکه برای هر دو حالت خالص و ناخالص، مؤلفه‌ی x ضریب شکست بیشتر از مؤلفه‌ی z است. افت و خیز ضریب شکست و ضریب خاموشی در هر دو حالت برای پرتو های کمتر از ٨ eV می باشد. برای مؤلفه‌ی x، تا انرژی ٥/٤ eV، ضریب شکست رفتاری کاهشی داشته و پس از آن به عدد ٠/٧ نزدیک می‌شود. این درحالی‌ست که برای مؤلفه‌ی z، تا انرژی ٤ eV رفتاری یکنواخت مشاهده می‌شود. سپس، از انرژی ٥/٢ تا ٧/٦ eV رفتار این مؤلفه از ضریب شکست کاهشی و سپس به مقدار ثابت ٠/٦٩ نزدیک می‌گردد. در بخشی که با افزایش انرژی پرتوهای تابشی ضریب شکست افزایش می‌یابد ماده شفاف است؛ بنابراین، برای

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

پاسخ zz، استنین خالص (ناخالص) در بازه‌ی انرژی فرابنفش از ۳/۷۱ تا ۵/۲۱ eV (۳/۷۹ تا ۵/۱۸ eV) شفاف است. بیشتریت ضریب شکست در جهت zz برای ماده خالص ۱/۹۳ و برای ماده آلایش شده ۱/۸۸ است.

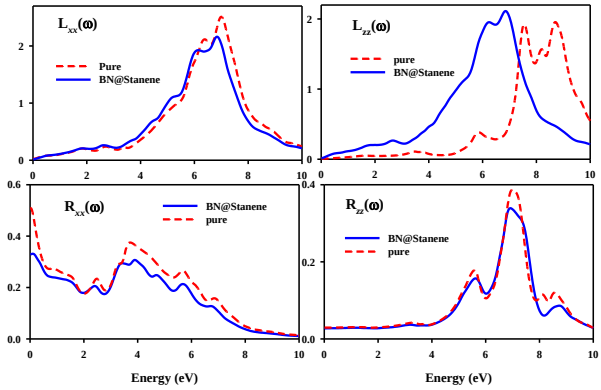


شکل٤: ضرایب شکست (بالا) و خاموشی (پایین) برای ساختارهای استنین خالص (خط‌چین) و ناخالص (خط پر).

ضریب خاموشی میزان جذب پرتوهای تابیده‌شده به ماده را مشخص می‌کند. مطابق شکل٤، بیشینه‌ی ضریب خاموشی برای پرتوهای قطبیده‌شده در جهت x در ماده خالص ۱/۵۳ برای پرتوهایی با انرژی ۳/۲۷ eV و در ماده آلایش شده ۱/٤٤ و پرتوهایی با انرژی ۳/۳۳ eV است. بیشینه ضریب خاموشی در راستای z برای ماده خالص ۱/۳٦ در انرژی ٦/۷۸ eV و برای ماده آلایش‌شده ۱/۲۹ در انرژی ٦/۷۳ eV است. بنابراین در مقادیر مذکور، برای استنین خالص و ناخالص بیشترین جذب پرتو فرودی رخ می‌دهد.

تابع اتلاف، اتلاف انرژی الکترون در حال گذر از ماده را نشان می‌دهد. اصلی‌ترین بیشینه در تابع اتلاف در شکل ۵، رزونانس پلاسمونی و ناشی از برانگیختگی طولی چگالی بار ظرفیت است. این بیشینه که منطبق با صفرهای تابع دی‌الکتریک است برای مؤلفه‌ی x ساختار خالص (ناخالص) در انرژی ۷/۰ eV (٦/۸٤) رخ می‌دهد. این مقدار انرژی برای مؤلفه‌ی z ساختار خالص ۸/۸٤ eV است، درحالی‌که برای مؤلفه‌ی متناظر در ساختار ناخالص تغییر چشم‌گیری مشاهده نمی‌شود.

تابع بازتاب میزان پرتوهای بازتاب‌شده از سطح ماده را بیان می‌کند و با ضریب شکست و ضریب خاموشی مرتبط است. برای پاسخ zz (xx) در شکل ۵، بیشترین بازتاب در ناحیه بین ۸/٤۷ تا ۵/٤۵ eV (۲/۹ تا ٦/۰ eV) الکترون ولت می باشد، که این مقادیر در محدوده امواج فرابنفش (مرئی) است. تفاوت استنین خالص و ناخالص در هر دو جهت تابش در بیشینه‌ی بازتاب است، به‌طوری‌که حد اکثر بازتاب در ماده خالص از ماده ناخالص بیشتر است.



شکل۵: توابع اتلاف (بالا) و بازتاب (پایین) برای استنین خالص (خط‌چین) و ناخالص (خط پر).

نتیجه‌گیری

در این مطالعه خواص الکترونی و اپتیکی استنین خالص و آلایش‌شده با اتم‌های بور و نیتروژن بررسی شد. براساس نتایج حاصل، استنین آلایش‌شده دارای گاف الکترونی به پهنای ۰/۱٤ eV، و بنابراین دارای خواص نیم‌رسانایی است. خواص اپتیکی بررسی شده نشان داد که در استنین آلایش شده بخش استاتیک خواص اپتیکی مثل قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک، ضرایب شکست و خاموشی، و توابع اتلاف انرژی و بازتاب، در راستای x کمتر از استنین خالص است، و این اختلاف در پرتوهای با قطبش z بسیار ناچیز است. بیشینه‌های توابع نیز در استنین خالص از استنین آلایش‌شده بلندتر است که بیانگر حرکت روان‌تر الکترون‌ها در محیط ماده است.

مراجع

[۱] P. Garg, I. Choudhuri, A. Mahata, and B. Pathak, Phys. Chem. Chem. Phys., **19**, 3660 (2017).
[۲] S-C. Wu, G. Shan and B. Yan, Phys. Rev. B **90**, 054503 (2014).
[۳] M. Wang, L. Liu, C-C. Liu, and Y. Yao, Phys. Rev. B **93**, 155412 (2016).
[٤] Y. Xu, B. Yan, H-J. Zhang, J. Wang, G. Xu, P. Tang, W. Duan and S-C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **111**, 136804 (2013).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

خواص الکترونی و اپتیکی تک لایه‌های Sc_2C و Sc_2CO_2

نجادی ، معصومه ؛ دادستانی، مهرداد ؛ مالمیر ، مریم

دانشکده فیزیک، دانشگاه لرستان، خرم آباد

چکیده

این مطالعه بر مبنای نظریه تابعی چگالی(DFT) با استفاده از روش امواج تخت بهساخته‌ی خطی با پتانسیل کامل به بررسی خواص الکترونی و اپتیکی تک لایه‌های Sc_2C و Sc_2CO_2 از MXene ها می‌پردازد. ساختارهای نواری نشان می‌دهند Sc_2C فلز و Sc_2CO_2 یک نیمه رسانا با گاف غیر مستقیم به اندازه‌ی ۱/۸۸ ev است. همچنین، خواص اپتیکی مانند تابع دی الکتریک، طیف اتلاف انرژی، ضریب خاموشی و ضریب شکست نیز در راستای موازی با میدان و عمود بر میدان الکتریکی بررسی شده است. گاف قابل تنظیم Sc_2CO_2 آن را به یک ماده امیدوار کننده برای ابزارهای الکترونیک نوری تبدیل می‌کند.

واژه های کلیدی: *کاربید اسکاندیوم ، نظریه تابعی چگالی، گاف انرژی، خواص اپتیکی*

Electronic and optical properties of Sc_2C and Sc_2CO_2 monolayers

Nejadi, Massoume; Dadsetani, Mehrdad; Malmir, Maryam

Department of Physics, Lorestan University, Khorramabad

Abstract

This study based on the density functional theory (DFT) using full potential linear augmented plane wave method, investigate the electronic and optical properties of the Sc_2C and Sc_2CO_2 MXene monolayers. The band structures show that Sc_2C is metal and Sc_2CO_2 is a semiconductor with an indirect band gap of 1.88 eV. Also, Optical properties such as dielectric function, energy-loss function, extinction coefficient and refractive index were investigated for horizontal $E \| X$ and vertical $E \| Z$ applied fields. tunable bandgap makes Sc_2CO_2 as a promising material for optoelectronic devices.

Keywords*: Sc_2C, Density Functional Theory, Energy Gap, Optical Properties*

PACS No. 42, 73, 77, 78

مقدمه

در سال ۲۰۱۱ خانواده‌ی جدیدی از مواد دو بعدی به نام MXene توسط دانشمندان دانشگاه draxel با ساخت ماده‌ی کاربید تیتانیوم ($Ti_3C_2T_x$) کشف شد[۱]. برخی ویژگی‌های MXene ها قابلیت تنظیم شدن دارند و این قابلیت باعث کاربردی شدن آن‌ها در مواردی از قبیل ذخیره‌ی انرژی، حسگرهای زیستی و گازی و فوتوکاتالیز می‌شود[۲]. MXene ها با حذف لایه‌ی A از مکس‌فازها با فرمول کلی $M_{n+1}AXn$ و ساختار هگزاگونال با گروه فضایی p63/mmc بدست می‌آیند. در این فرمول M نشان‌دهنده‌ی یک فلز واسطه، A نماینده‌ی عناصر گروه P(بیشتر IIIA و IVA)، X نماینده‌ی C یا N و n=1,2,3 است. پیوند شبکه های مکس‌فازها قوی است، بنابراین جدا کردن لایه‌های $M_{n+1}Xn$ (فرمول MXene ها) و ساخت MXene با برش مکانیکی مکس‌فازها امکان پذیر نیست. در روند ایجاد MXene بیشتر از محلول‌های اسیدی حاوی فلوراید آبدار جهت حذف انتخابی لایه‌های عنصر A استفاده می‌شود. MXene سنتز شده با این محلول‌ها، مخلوطی از گروه‌های عاملی F ، O و OH دارد که در سطح آن به طور تصادفی توزیع می‌شود[۲-٤]. نوع گروه عاملی و طرز قرارگیری آن روی ویژگی‌های الکترونی، مکانیکی، اپتیکی، شیمیایی و حتی پایداری MXene موثر است[۲،٤]. در این

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

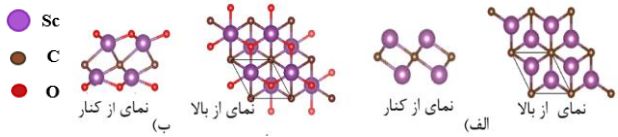
مطالعهSc_2C (کاربید اسکاندیوم) را به عنوان نماینده‌ی MXene ها انتخاب کردیم و از میان گروه‌های عاملی، اکسیژن را در نظر گرفتیم و خواص الکترونی و اپتیکی را برای آن‌ها بررسی کردیم. نمودارهای الکترونی نشان می‌دهد Sc_2C یک رسانا و Sc_2CO_2 یک نیمه رسانا با گاف غیر مستقیم که مقدارآن نسبت به سایر گروه‌های عاملی بیشتر است. مطالعات نشان می‌دهد با اعمال میدان یا فشار می‌توان گاف آن را به مستقیم تبدیل کرد[۵،۶] بنابراین، Sc_2C با گروه عاملی اکسیژن می تواند یک ماده‌ی امیدوارکننده در صنایع الکترونیک باشد.

روش انجام محاسبات

محاسبات در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی، به روش امواج تخت بهساخته‌ی خطی با پتانسیل کامل (FPLAPW) و در کد WIEN2k انجام شده است. شعاع کره‌های موفین تین R_{MT} باید به گونه‌ای باشد که کره‌ها با هم همپوشانی نداشته باشند و در اینجا $R_{MT}K_{Max}=7$ استفاده شده است. و از تقریب شیب تعمیم یافته با تابعی پردو و همکاران (GGA-PBE) برای محاسبه‌ی پتانسیل تبادلی- همبستگی استفاده شده است. ثابت‌های شبکه و پارامترهای وابسته به موقعیت Z با همگرایی نیرو تا ۱/۰ mRy/a.u. بهینه شده‌اند.

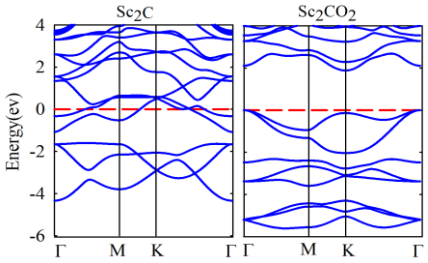
نتایج و بحث

محاسبه‌ی انرژی تشکیل نشان می‌دهد، ساختارهای Sc_2C و Sc_2CO_2 (شکل ۱) پایدار هستند[۷] و برای Sc_2CO_2 پایدارترین حالت برای قرار گرفتن گروه‌های عاملی این است که یک طرف بالای اتم‌های کربن و در طرف دیگر بالای مکان‌های خالی بین سه اتم همسایه‌ی کربن قرارگیرد که یک پیکربندی نامتقارن است و فقط در این حالت است که کمبود الکترون اکسیژن جبران می‌شود[۳]. پارامتر شبکه برای Sc_2C و Sc_2CO_2 برابر Å ۳/۳۲۰۸و Å ۳/۴۳۰ است. ساختارهای نواری برای این لایه‌ها در شکل ۲ نشان می‌دهند که Sc_2C رسانا و Sc_2CO_2 یک نیمه رسانا با گاف غیر مستقیم از Γ به K و مقدار آن ۱/۸۸ eV است که با نتایج دیگران تطابق خوبی دارد[۸].



شکل ۱) ساختار لایه‌های الف- Sc_2C ب- Sc_2CO_2

چگالی حالت‌های کلی و جزئی برای این ساختارها در شکل۳ آمده است. توزیع الکترون در طیف انرژی با چگالی حالت‌ها بیان می شود و قله‌های موجود نشان‌دهنده‌ی مشارکت اوربیتال‌ها در ساختار نواری است.



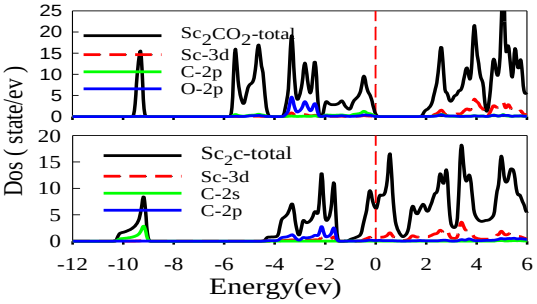
شکل ۲) ساختار نواری

برای Sc_2C چگالی حالت‌ها روی سطح فرمی صفر نیست و حالت‌ها اطراف سطح فرمی با هم همپوشانی دارند. اوربیتال 3d اتم Sc بیشترین سهم را در چگالی حالت‌های اطراف سطح فرمی دارد، اما زیر سطح فرمی از ۱/۴۴eV- تا ۴/۵eV- و از صفر تا ۱/۲۳eV- هیبریداسیون شدیدی بین اوربیتال 3d اتم Sc و 2p اتم کربن داریم و این دو ناحیه با یک گاف کوچک به اندازه‌ی ۰/۲eV از هم جدا شده‌اند. پایین ترین حالت‌های قرار گیری از حدود eV ۹- تا ۱۰/۲ eV- بیشتر ناشی از اوربیتال 2s اتم C است. اما در Sc_2CO_2 با اضافه شدن اکسیژن ساختار الکترونی تغییر می‌کند، اتم‌های Sc الکترونهای خود را به اتم اکسیژن می‌دهند و همین باعث جابه‌جایی انرژی فرمی می‌شود که موجب ایجاد گاف و نیمه رسانا شدن ساختار می‌شود(اوربیتال 2p اتم اکسیژن نقش عمده‌ای دارد). نمودار چگالی حالت‌های جزئی نشان می‌دهد، اوربیتال 3d اتم Sc بیشترین سهم را درحالت‌های بالای سطح فرمی دارد و برای پایین سطح فرمی تا انرژی eV ۵/۷۶- بیشترین سهم مربوط به اوربیتال 2p اتم اکسیژن، اوربیتال 3d اتم Sc و اوربیتال 2p اتم کربن است و حالتهای جدید زیر سطح فرمی از هیبرید اوربیتال 2p اتم اکسیژن و اوربیتال 3d اتم Sc ایجاد می‌شوند.

خواص نوری یعنی چگونگی پاسخ ماده به نور که جزء امواج الکترومغناطیس است. لایه‌های مورد مطالعه، ساختار هگزاگونال

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

دارند (a=b≠c) و خواص اپتیکی برای این ساختارها در راستای x و y یکسان است اما با راستای z متفاوت است.

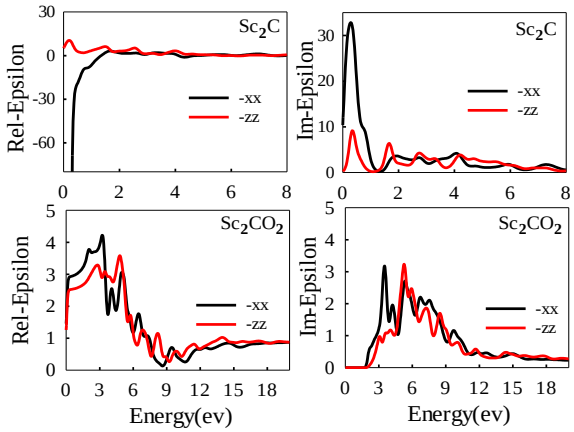


شکل ۳) چگالی حالت‌های کلی وجزئی

تابع دی‌الکتریک پاسخ بلور به میدان الکترومغناطیسی خارجی است که به ساختار نواری بسیار حساس است و با تعیین آن می‌توان سایر کمیت‌های اپتیکی را به‌دست آورد. این تابع دو بخش حقیقی(ε_1) و موهومی (ε_2) دارد. به ازای مقادیر منفی ε_1 ماده رفتار فلزی و برای مقادیر مثبت رفتار دی‌الکتریک نشان می‌دهد، سهم بخش موهومی ناشی از گذارهای بین نواری است.

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 \qquad (۱)$$

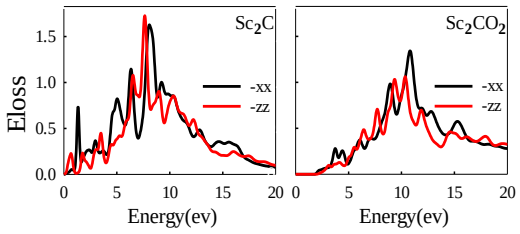
تابع دی‌الکتریک به ازای فرکانس صفر ثابت دی‌الکتریک استاتیک نامیده می‌شود و به گاف نواری بستگی دارد، مقدار آن برای Sc_2C در راستای z ، ۵/۶۳ است و در راستای x به سمت مقادیر منفی بزرگ(در انرژی صفر مقدار ۲۰۷۷-) میل می‌کند. در محدوده‌ای که مقدار ε_1 منفی است اجازه‌ی عبور نور را نمی‌دهد و حداکثر بازتاب را داریم. بنابراین با تغییر جهت تابش نور رفتار ماده متفاوت می‌شود به گونه‌ای که در راستای x ، Sc_2C رفتار فلزی و در راستای z رفتار دی‌الکتریک دارد. در نمودار بخش موهومی تابع دی‌الکتریک (شکل ٤) برای این ساختار در راستای xx (zz) چندین بیشینه داریم که شاخص‌ترین آن‌ها در انرژی‌های eV ۰/۲۸ (۰/۳٤ eV) قرار دارد. از حدود ۸ eV به بعد مقدار گذار به حداقل می‌رسد و رفتار تابع دی‌الکتریک در دو راستا مشابه می‌شود. مقدار ثابت دی الکتریک استاتیک برای Sc_2CO_2 در راستای xx(zz) برابر ۱/٦۲ (۱/۲۹) است، برای هر دو ساختار از eV ۷/۹۵ تا ۲۵ eV مقدار ε_1 بین صفر و یک است یعنی ماده رفتاری شبیه خلاء دارد. قله‌ها در نمودار بخش موهومی ناشی از گذارهای بین نواری هستند. در این نمودار بیشینه‌های متعددی وجود دارد که شاخص ترین آن‌ها در راستای xx(zz) به اندازه‌ی ۳/۱۸ (۳/۲۳) در انرژی‌های ۵/۳٤eV (۵/۲٦ eV) است که عمدتا ناشی از انتقال‌های الکترونی از اربیتال‌های 2p اتم کربن در نوار ظرفیت به حالت‌های 3d اتم Sc در نوار رسانش است.



شکل ٤) نمودارهای بخش حقیقی(Rel) وموهومی(Im) تابع دی الکتریک

اولین منطقه‌ی شروع افزایش برای بخش موهومی تابع دی‌الکتریک در راستای xx(zz) در انرژی حدود ۱/۷۸eV (۱/۹٤eV) است که این مقدار را گاف اپتیکی می‌نامند که با گاف انرژی همخوانی دارد و ماده در این محدوده‌ی انرژی شفاف عمل می‌کند.

یک کمیت مهم در بررسی خواص اپتیکی، تابع اتلاف انرژی الکترون (EELS) است این تابع، احتمال اتلاف انرژیE در واحد طول را می‌دهد. بیشینه‌ی قله‌ها در طیف اتلاف برانگیختگی‌های پلاسمون (تحریک جمعی الکترونها) و گذارهای بین نواری را نشان می‌دهد.



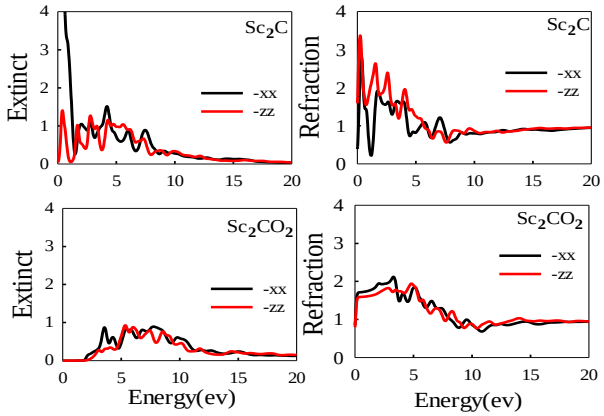
شکل ۵) طیف اتلاف انرژی الکترون

شکل ۵ طیف اتلاف را برای دو ساختار مورد مطالعه نشان می‌دهد. شاخص‌ترین بیشینه برای Sc_2C در راستای xx(zz) به اندازه‌ی ۸/۰٦۸eV (۷/٦۳eV) در انرژی ۱/٦۲۷ (۱/۷۲۷) و برای Sc_2CO_2 در راستای xx(zz) به اندازه‌ی ۱/۳٤ (۱/۰٦۷)در انرژی ۱۰/۸۱٦eV (۱۰/۳۵٤eV) است که متناظر با پلاسمون‌های حجمی

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

هستند. برای Sc_2CO_2 در راستای xx از صفر تا ۱/۹٤ eV و در راستای zz از صفر تا ۲/۲۱ eV اتلاف نداریم یا خیلی ناچیز است. در محدوده‌ی انرژی‌های کم(تا ٦eV) اتلاف کمتر است اما در انرژی‌های بالاتر بیشینه‌های اتلاف برای هر دو ساختار افزایش می‌یابد و به ازای انرژی‌های بیشینه در طیف اتلاف انرژی قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک مقادیر کوچکی دارند. نمودارها نشان می‌دهند، اتلاف برای Sc_2CO_2 کمتر است و بیشینه قله هم به سمت انرژی بالاتر از ۱۰ eV جابه‌جا شده‌است.

تابع ضریب شکست یک کمیت مختلط است که بخش حقیقی آن ضریب شکست ماده است و چگونگی انتشار امواج الکترومغناطیس را در محیط نشان می دهد و بخش موهومی ضریب خاموشی است که معیاری از جذب امواج الکترومغناطیس است و چگونگی پاشندگی امواج را نشان می‌دهد. با توجه به نمودار شکل ٦ ضریب شکست استاتیک برای Sc_2C و Sc_2CO_2 در راستای xx(zz) به ترتیب ۰/٤٦٤(۱/۷٦۸) و ۰/۹٤٦(۰/۸۷۹) است.



شکل ٦) نمودارهای ضریب شکست (Refraction) و ضریب خاموشی(Extinct)

نمودار ضریب شکست و ضریب خاموشی مربوط به Sc_2C در دو راستا برای انرژی‌های کمتر از ۱۰eV ناهمسانگردی بیشتری دارند. برای Sc_2C از ۷/۳۸eV تا ۲۳/۵ eV و برای Sc_2CO_2 از حدود ۸/۵eV تا ۱٤eV ضریب شکست کمتر از یک می‌شود که نشان‌دهنده‌ی شفافیت ماده است. برای Sc_2C بیشترین مقدار ضریب خاموشی مربوط به انرژی کمتر از ۱eV(در انرژی ۰/۰٤۰۸ eV به اندازه‌ی ۲٤/۵۵) در راستای x است که نشان‌دهنده‌ی کمترین عبور و بیشترین جذب در این محدوده است و برای Sc_2CO_2 در راستای xx(zz) شاخص‌ترین بیشینه در انرژی ۷/۷٦eV (۵/۳٤eV) است، در راستای x و در محدوده صفر تا ۱/۸eV و در راستای z در محدوده صفر تا ۲/۱۸eV ضریب خاموشی تقریبا صفر است و در این محدوده عبور کامل نور را داریم. نمودارهای قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک و تابع اتلاف هم عبور کامل نور را در این محدوده برای Sc_2CO_2 تأیید می‌کنند.

نتیجه گیری

خواص الکترونی و اپتیکی برای لایه‌های Sc_2C و Sc_2CO_2 با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی بررسی شد. نمودارهای ساختار نواری نشان می‌دهند Sc_2C یک رسانا و Sc_2CO_2 یک نیمه رسانا با گاف غیر مستقیم به اندازه‌ی ۱/۸۸eV است. در نمودار تابع اتلاف Sc_2CO_2 تا حدود ۲/۲eV اتلاف انرژی نداریم که عبور کامل نور را نشان می‌دهد. در محدوده‌ی زیر ۲eV در هر دو راستا مقدار ε_2 صفر است که نشان‌دهنده‌ی وجود گاف در این ناحیه است و رفتار تابع اتلاف را در این ناحیه تایید می‌کند.

مرجع‌ها

[۱] Nagub,M,et al.,Two-Dimensional Nanocrystals produced by Exfoliation of Ti_3AlC_2 . advanced Materials,2011. 23(37):p.4248-4253
[۲] Anasori, B.; Lukatskaya, M.R.; Gogotsi, Y.; "2D metal carbides and nitrides (MXenes) for energy storage", Nat. Rev. Mater. 2, p. p. 16098, 2017.
[۳] X. Zhang, Z. Ma, X. Zhao, Q. Tang and Z. Zhou, J. Mater. Chem. A, 3(9), 2015.
[۴] A L Ivanovskii, A N Enyashin, Russ. Chem. Rev. 82 (8), 735 – 746, 2013.
[۵] Lee Y, Cho S B and Chung Y C. 2014 ACS Appl. Mater. Interfaces 6. 14724
[٦] Lee Y, Hwang Y, Cho S B and Chung Y C 2014 Phys. Chem. Chem.
Phys. 16 26273
[۷] Khazaei, M.; Arai, M.; Sasaki, T.; Chung, C.-Y.; Venkataramanan, N. S.; Estili, M.; Sakka, Y.; Kawazoe, Y.; "Novel electronic and magnetic properties of two-dimensional transition metal carbides and nitrides", *Adv. Funct. Mater.* 23, p. p. 2185–2192, 2013.
[۸] Wang, Shun.; Du, Y.Lei.; Liao, Wen.He.; *Chin. Phys.* B vol. 26, No. 1 017806, 2017.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی تاثیر نقیصه های نقطه ای بر روی خواص الاستیکی دی اکسید اورانیوم از طریق شبیه سازی اتمی

باسعادت، محمدرضا؛ پیامی شبستر، محمود؛ شیخی، سمیرا

پژوهشکده فیزیک و شتابگرها، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، سازمان انرژی اتمی ایران، انتهای خیابان کارگر شمالی، تهران

چکیده

دی اکسید اورانیوم به عنوان سوخت در راکتورها مورد استفاده است. داشتن اطلاعات ساختاری و مکانیکی از این ماده، کمک بسیار زیادی در درک نحوه رفتار آن در شرایط کار راکتور مهیا می کند. در این پژوهش به مطالعه ساختار دی اکسید اورانیوم پرداخته و خواص الاستیکی آن را مورد بررسی قرار می دهیم. نتایج به دست آمده را با نتایج تجربی مقایسه و اعتبار سنجی می کنیم. سپس در حضور نقیصه های نقطه ای به بررسی نحوه تغییرات این خواص الاستیکی می پردازیم. نتایج نشان می دهند که در حضور نقیصه های نقطه ای مدول حجمی و یانگ کاهش می یابد و این به معنی آن است که سختی ساختار کاهش خواهد یافت. همچنین افزایش ثابت الاستیک برشی (C_{12}) نشان دهنده این است که حضور نقیصه های نقطه ای باعث افزایش قابلیت حرکت سطوح لایه ای در ساختار شده است.

واژه های کلیدی: *دی اکسید اورانیوم، نقیصه های نقطه ای، خواص الاستیکی، ثابت های الاستیک*

Investigation of point defect effects on elastic properties of UO_2 using atomistic simulation

Basaadat, Mohammad-Reza; Payami Shabestar, Mahmoud; Sheykhi, Samira

Physics and Accelerator Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, AEOI, Tehran.

Abstract

Uranium dioxide is used as fuel in nuclear reactors. The structural and mechanical information's about this material can help us to understand its behavior under the reactor's condition. These properties of uranium dioxide have been considered in this study and the results have been compared with experimental data to verify the validity of its potential. Then, the elastic properties have been monitored in the presence of point defects. The results showed that the Young and bulk moduli were decreased and this means that, the stiffness of the structure was degraded in the presence of point defects. In addition, increasing in shear elastic constant (C_{12}) shows that the point defects can be caused to increase in surface layer mobility in the structure.

***Keywords**: Uranium dioxide, point defects, elastic properties, elastic constants*

PACS No.

مقدمه

ماده‌ی اصلی که برای سوخت راکتورها به کار می‌رود دی اکسید اورانیوم است که به علت خواصی که در جذب نوترون و شکافت هسته‌ای دارد مورد استفاده قرار می‌گیرد. دی اکسید اورانیوم در حال حاضر مهمترین نوع سوختی است که در کلیه‌ی راکتورهای آبی به کار گرفته می شود. هنگامی‌که یک جامد کریستالی در معرض تابش ذرات پر انرژی قرار گیرد، در اثر برخورد، اتمهای آن از جایگاههای بلوری جابجا شده و باعث به هم خوردن نظم بلوری می شود که در نتیجه آن خواص فیزیکی تغییر می‌کند. با توجه به اینکه UO_2 متداولترین سوخت هسته‌ای در راکتورهای قدرت می‌باشد، این سوخت‌ها باید قادر باشند تا سال‌ها تحت شرایط سخت با آسیب‌های تابشی متنوع کار کنند.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

پاره‌های شکافت ایجاد شده در شبکه‌ی کریستالی ماده‌ی سوخت سبب ایجاد نقیصه‌هایی در آن می‌شود که در نتیجه آن خواص فیزیکی ماده‌ی سوخت دچار تغییر می‌شود. سوخت دی اکسید اورانیوم تحت شرایط راکتور و یا حتی بعد از ساخت اغلب به شکل $UO_{2\pm x}$ یافت می شود. نقیصه های نقطه ای در سوخت های اکسیدی اثرات مضری بر خواص مکانیکی و حرارتی را دارند. در میان آن ها بین نشین های اکسیژن مهم ترین محصول فرعی چرخه سوخت هسته ای می باشد، از آنجایی که بین نشین های اکسیژن انرژی تشکیل منفی دارند سوخت های اکسیدی می توانند به راحتی اکسید شده و هایپراستوکیومتری شوند. اثر بین نشین های اکسیژن روی اکسیدهای اکتینیدی و فرایند پخش آن ها ، سالها از مهم ترین موضوعات مطالعاتی مورد توجه بوده است [۶-۱].

در این پژوهش ابتدا به بررسی ساختار UO_2 پرداخته از این ساختار را از لحاظ خواص الاستیکی مورد بررسی قرار می دهیم. سپس اثر بین نشین های اکسیژن را بر این خواص مکانیکی UO_2 با دقت مطالعه کرده و نحوه رفتار الاستیکی ساختار را در حضور این نقیصه ها بررسی خواهیم کرد.

تئوری و روش های محاسباتی

تمام محاسبات این بخش اط طریق بسته نرم افزاری GULP [۷] انجام شده است. GULP بر اساس روش های میدان نیرو[۱] محاسبات را انجام می دهد. ساختار سلول اولیه UO_2 دارای ۱۲ اتم بوده و ابرسلول آن (برای محاسبات حضور نقیصه ها) نیز با تکرار ۴×۴×۴ دارای ۷۶۸ اتم خواهد بود. برای محاسبات ثابت های الاستیک از رابطه بین ماتریس تنش و کرنش استفاده می شود که برای ساختار مکعبی:

$$\sigma = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & & & \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & & 0 & \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & & & \\ & & & C_{44} & 0 & 0 \\ & 0 & & 0 & C_{44} & 0 \\ & & & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \varepsilon \quad (۱)$$

که در آن σ و ε به ترتیب ماتریس تنش و کرنش می باشند. همچنین بر اساس تقریب های ویت و رویس [۸] می توان مدولهای الاستیک را از این ثابت های الاستیک به دست آورد (روابط ۲-۵).

$$K_V = \frac{1}{3}C_{11} + \frac{2}{3}C_{12} \quad (۲)$$

$$G_V = \frac{1}{5}C_{11} - \frac{1}{5}C_{12} + \frac{3}{5}C_{44} \quad (۳)$$

$$\frac{1}{K_R} = 3S_{11} + 6S_{12} \quad (۴)$$

$$\frac{1}{G_R} = \frac{4}{5}S_{11} - \frac{4}{5}S_{12} + \frac{3}{5}S_{44} \quad (۵)$$

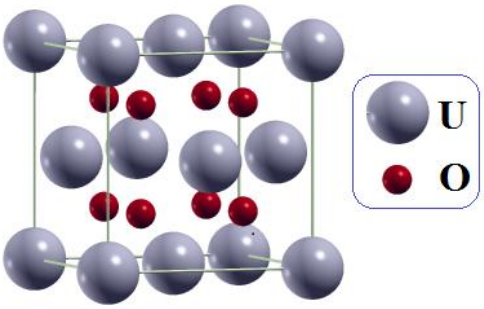
که در آن S ماتریس انطباق می باشد. همچنین مدول یانگ و نسبت پواسون نیز بصورت زیر بدست می آیند:

$$\nu = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{3G}{3K+G}\right); \frac{1}{E} = \frac{1}{3G} + \frac{1}{9K} \quad (۶)$$

اندیس ناهمسانگردی که یکی دیگر از پارامترهای الاستیکی ساختار است نیز بصورت زیر بیان می شود [۸]:

$$A^U = 5\left(\frac{G_V}{G_R}\right) + \left(\frac{K_V}{K_R}\right) - 6 \quad (۷)$$

بنابراین با محاسبه ثابت های الاستیک سایر کمیت های الاستیکی را محاسبه خواهیم نمود



شکل ۱- ساختار یونیت سل UO_2 با ۱۲ اتم.

نتایج و بحث

دی اکسید اورانیوم به دلیل وجود اوربیتال نیمه پر f ، یک ماده‌ی همبسته قوی است وبه دلیل وجود حالات نیمه پایدار، یافتن حالت پایه‌ی صحیح الکترونی کاری دشوار می‌باشد. ساختار UO_2 به صورت مکعبی مرکز سطحی (FCC) و کاملا متقارن است. طبق

[۱] Force-field method

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی های آزمایشگاهی بلور دی اکسید اورانیوم یک عایق مات است که در دمای زیر ۳۰ کلوین خاصیت پادفرومغناطیسی غیرهم خط دارد و در دماهای بالاتر یک پارامغناطیس است. ساختار کپه‌ای این بلور خالص متعلق به گروه فضایی ۲۲۵ می باشد. ساختار UO_2 در شکل ۱ و ثابت های شبکه و الاستیک و همچنین مدولهای الاستیک برای ساختار UO_2 در جدول ۱ نشان داده شده است.

جدول ۱. ثابتهای شبکه والاستیک برای ساختار UO2.

مقادیر تجربی†	این کار	کمیت های الاستیک
۵/۴۷	۵/۵۶	a
۳۸۹	۳۹۷/۱	C_{11}
۱۱۹	۱۰۰/۴	C_{12}
۶۰	۶۶/۸	C_{44}
۲۰۷	۱۹۹/۳	K
۸۳/۶	۹۲/۵	G
۲۲۱	۳۵۶/۶	E
۰/۳۲۲	۰/۲۰۲	υ
۰/۸۳۲	۰/۸۰۷	A^U

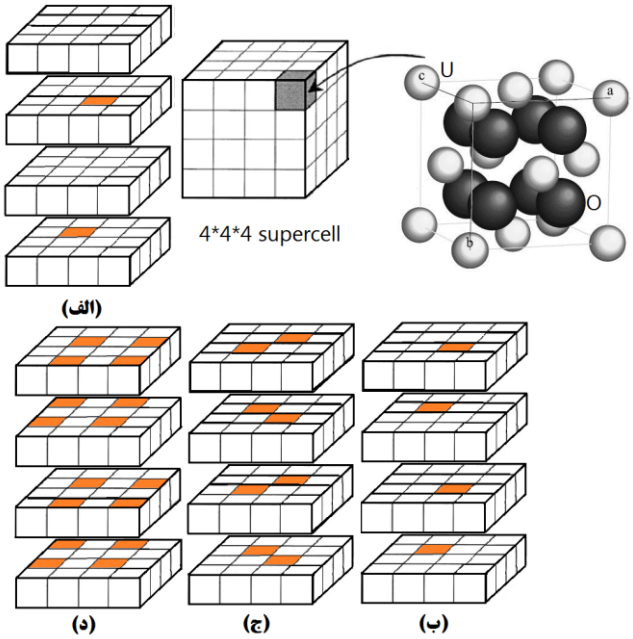
† منبع [۹]

دقت داشته باشید که برای هر کدام از مدولها یک حد بالا (ویت) و یک حد پایین (رویس) وجود دارد که در جدول مقدار میانگین آنها بکار رفته است.

همچنانکه ملاحظه می شود نتایج محاسبات با نتایج تجربی تطابق بسیار خوبی را نشان می دهد و این نشان می دهد که پتانسیل مورد استفاده نتایج مناسبی را برای اینگونه محاسبات مهیا می کند.

در بخش دوم به بررسی حضور نقیصه های نقطه ای مانند حضور اتمهای اکسیژن بین نشین در ساختار می پردازیم. بنابراین در این بخش در واقع ساختار UO_{2+x} $(0.008<x<0.06)$ را بررسی خواهیم کرد. چهار ساختار را با ۲، ۴، ۸ و ۱۶ اتم اکسیژن بین نشینی که مقدار x برای آنها به ترتیب ۰/۰۰۷۸، ۰/۰۱۵۶، ۰/۰۳۱۳ و ۰/۰۶۲۵ است تولید می کنیم (شکل ۲).

همانطور که در شکل ملاحظه می شود اتم های اکسیژن در مکان های مرکز سلول های اولیه ای قرار می گیرند که در شکل سلول آن با رنگ نارنجی مشخص شده است. همچنان که مشخص است با توجه به تعداد اکسیژن ها، توزیع آنها به گونه ای در نظر گرفته شده است که بیشترین همسانگردی را تا حد امکان داشته باشد. نتایج حاصل از محاسبات برای ثابتها و مدولهای الاستیک در شکل ۳ نشان داده شده است.

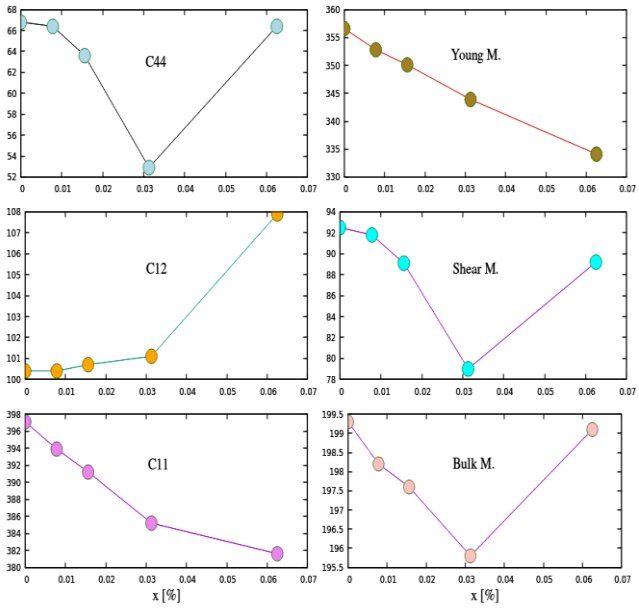


شکل ۲- ابرسلول ۴×۴×۴ از سلول اولیه UO2 که در شکل نشان داده شده است. سلول هایی که با رنگ نارنجی مشخص شده اند، شامل اتم اکسیژن بین نشینی هستند که درصد اکسیژن بین نشینی در: الف) x=0.0078 ب) x=0.0156 ج) x=0.0313 و د) x=0.0625 می باشد.

همانطور که از روی شکل مشخص است، C_{11} با افزایش میزان بین نشینی اکسیژن کاهش می یابد و با توجه به اینکه این ثابت بیانگر میزان سختی ساختار در راستاهای X، Y و Z است می توان گفت سختی ساختار کاهش خواهد یافت. مدول یانگ نیز همانند این ثابتها معرف میزان سختی ساختار می باشد و مطابق انتظار مقدار آن با افزایش بین نشینی کاهش می یابد. ثابت C_{12} با افزایش میزان بین نشینی افزایش می یابد و این بدین معناست که که مقاومت ساختار در برابر خمش بیشتر می شود. رفتار سایر ثابت های C_{44} و مدول برشی و حجمی یکسان است که در آنها با افزایش مقدار

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بین نشینی اکسیژن مقدار این ثابتها در ابتدا (تا x=0.0313) کاهش یافته و در x=0.0625 افزایش می یابد. این بدین معناست که ساختار با افزایش میزان بین نشینی، از مقاومت در برابر حرکات برشی و مقاومت در برابر فشار هیدروستاتیکی آن کاسته شده و تنها برای x=0.0625 کاهش این مقاومتها بسیار کمتر است که علت این پدیده را می توان در نوع توزیع اتمهای اکسیژن بین نشین در ساختار جستجو کرد.



شکل ۳- نمودار ثابتها و مدول های الاستیک با تغییر درصد ناخالصی

همانطور که در شکل ۲ ملاحظه می شود برای سه حالت اول، توزیع اکسیژن ها طبیعتا بصورت کاملا همسانگرد انجام نشده است اما این موضوع برای حالت چهارم میزان همسانگردی ساختار بیشتر است، بطوریکه می توان این موضوع را در ضریب ناهمسانگردی ساختار ملاحظه نمود. ضریب ناهمسانگردی ساختار در حالت های بدون نقیصه، با ۲، ۴، ۸ و ۱۶ اکسیژن بین نشینی اضافی به ترتیب برابر با ۰/۸۳۲، ۰/۷۹۵، ۰/۸۷۵، ۱/۳۷۳ و ۰/۶۵۳ می باشد. همانطور که ملاحظه می شود، پس از ورود نقیصه با افزایش درصد نقیصه میزان ناهمسانگردی ساختار نیز (بجز برای ساختاری با ۱۶ نقیصه اکسیژن بین نشینی) افزایش یافته و هر چه میزان تقارن ساختار بهم بریزد، انتظار می رود که از لحاظ الاستیکی سیستم دچار تنزل شود. همانطور که میبینیم مقدار ثابت های برشی و حجمی با اندکی کاهش، نزدیک به مقدار ساختار بدون نقص هستند. بنابراین هر چه نوع توزیع نقیصه ها، تقارن ساختار را بیشتر مختل کند میزان کاهش خواص الاستیکی نیز بیشتر خواهد شد.

نتیجه گیری

محاسبات بر روی ساختار UO_2 انجام شد و با توجه به نتایج به دست آمده برای ثابت شبکه و ثوابت الاستیک ملاحظه شد که تطابق خوبی با نتایج تجربی بدست آمده است. همچنین پس از ورود اکسیژن بین نشینی به عنوان نقیصه نقطه ای در ساختار، ملاحظه شد در حالت کلی میزان سختی ساختار با افزایش میزان نقیصه، کاهش یافته و تنها سیستم از لحاظ قابلیت خمش ساختار با افزایش نقیصه، افزایش را تجربه می کند. و در نهایت ملاحظه شد که نحوه توزیع نقیصه ها در ساختار و میزان همسانگرد بودن آن رابطه مستقیمی با کاهش سختی جسم خواهد داشت.

مرجع‌ها

[1] Kim, K.; Olander, D. Oxygen diffusion in UO2-x. *J. Nucl. Mater.* **1981**, *102*, 192–199.
[2] Lucuta, P.; Matzke, H.; Verrall, R. Thermal conductivity of hyperstoichiometric SIMFUEL. *J. Nucl. Mater.* **1995**, *223*, 51–60.
[3] Pakarinen, J.; Khafizov, M.; He, L.; Wetteland, C.; Gan, J.; Nelson, A.T.; Hurley, D.H.; El-Azab, A.; Allen, T.R. Microstructure changes and thermal conductivity reduction in UO2 following 3.9 MeV He2+ ion irradiation. *J. Nucl. Mater.* **2014**, *454*, 283–289.
[4] Watanabe, T.; Srivilliputhur, S.G.; Schelling, P.K.; Tulenko, J.S.; Sinnott, S.B.; Phillpot, S.R. Thermal Transport in Off-Stoichiometric Uranium Dioxide by Atomic Level Simulation. *J. Am. Ceram. Soc.* **2009**, *92*, 850–856.
[5] Mitchell, K.; Park, J.; Resnic, A.; Horner, H.; Farfan, E. B.,Phonon scattering and thermal conductivity of actinide oxides with defects. *Appl. Sci.* **2020**, *10*, 1860; doi:10.3390/app10051860
[6] J. D. Gale, A. L. Rohl, Mol. Simul. 29 (2003) 291.
[7] R. Hill, "The elastic behaviour of a crystalline aggregate." Proceedings of the Physical Society. Section A 65.5 (1952): 349
[8] S. I. Ranganathan, M. Ostoja-Starzewski, Universal elastic anisotropy index, Phys. Rev. Lett. 101 (2008) 055504.
[9] M. Idiri, T. Le Bihan, S. Heathman, J. Rebizant, Behavior of actinide dioxides under pressure: Uo2 and tho2, Physical Review B 70 (1) (2004)014113.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی ساختار نواری و خواص اپتیکی آلیاژهای $InAs_xSb_{1-x}(x=0.25, 0.75)$ تحت کشش هیدرواستاتیک شبکه

نامجو ، شیرین[۱] ؛ پوشنیگ، پیتر[۲]

[۱]گروه فیزیک، دانشگاه لرستان ، خرم آباد

[۲]موسسه فیزیک، دانشگاه گراتس، گراتس، اتریش

چکیده

ساختار نواری و خواص اپتیکی ترکیبات تیمرسانای $InAs_xSb_{1-x}(x=0.25, 0.75)$ تحت کشش هیدرواستاتیک شبکه بااستفاده از نظریه تابعی چگالی و بکارگیری بسته محاسباتی Wien2k مورد بررسی قرار گرفته است. در این ترکیب‌ها تحت کشش هیدرواستاتیک شبکه، گذار به سمت نیمرساناها با گاف نواری صفر و نظم نواری وارون اتفاق می افتد. با بکارگیری تقریب فاز تصادفی به بررسی تغییرات خواص اپتیکی با تبدیل شدن این ترکیب‌ها به نیمرساناها با گاف نواری صفر پرداخته شده است. مطابق نتایج بدست آمده، ثابت دی الکتریک با افزایش کشش شبکه به صورت خطی افزایش می‌یابد و ساختارهای اصلی در طیف‌های اپتیکی به سمت انرژی های پایین‌تر میل می‌کنند. همچنین دیده می شود که تحت کشش شبکه جذب اپتیکی در ناحیه نور مرئی و فروسرخ افزایش پیدا می‌کند.

واژه های کلیدی: *کشش هیدرواستاتیک شبکه،تقریب فاز تصادفی، نیمرساناها با پهنای گاف کوچک.*

Band structure and optical properties of $InAs_xSb_{1-x}(x=0.25, 0.75)$ alloys under hydrostatic lattice expansion

Namjoo, Shirin[1]; Puschnig, Peter[2]

[1] Department of Physics, Lorestan, Khorramabad,
[2] Institute of Physics, University of Graz, Graz, Austria

Abstract

Applying hydrostatic lattice expansion, the electronic band structure and optical properties of $InAs_xSb_{1-x}(x=0.25, 0.75)$alloys have been investigated using density functional theory by employing the Wien2k package. Under hydrostatic lattice expansion, conversion to zero band gap with inverted band order occurs. Using the random phase approximation, the changes of optical properties upon the transformation to zero band gap semiconductors have been investigated. According to the results, the static dielectric constant increases linearly and the main structures in the optical spectra shift toward lower energies. It can also be seen that under hydrostatic expansion, the optical absorption increases in infrared and visible regions.

Keywords*: Hydrostatic lattice expansion, Random Phase Approximation, Small band Gap semiconductors*
PACS No.71, 78

مقدمه

نیم¬رسانا ها ازجالب ترین و مفیدترین گروه جامدها هستند که کاربردهای فراوانی در ساخت انواع مختلف قطعه‌ها و وسایل الکترونیکی دارند. در حقیقت نیم¬رسانا ها سنگ بنای الکترونیک نوین به‌شمار می‌آیند. به‌دلیل تکامل و توسعه قطعه‌های الکترونیکی بر پایه نیم¬رسانا ها، امروزه نیم¬رسانا ها از اهمیت بسیاز زیادی برخوردار هستند. از جمله ترکیب های نیم¬رسانای پر کاربرد می-توان به ترکیب های III-V اشاره کرد. ترکیب های نیم رسانای

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

III-V از دو عنصر تشکیل شده‌اند که یکی از آن‌ها متعلق به گروه سوم و دیگری متعلق به گروه پنجم جدول تناوبی است. InAs و InSb و آلیاژهای سه گانه آن‌ها دارای کوچکترین پهنای گاف در میان ترکیب‌های نیمرسانای III-V هستند. در دسته ترکیب‌های نیم¬رسانا با پهنای گاف کم، انرژی آستانه مورد نیاز برای حرکت الکترون‌ها از حالت‌های اشغال شده در نوار ظرفیت به حالت‌های خالی در نوار رسانش بسیار کم است و همین امر سبب بروز ویژگی های یکتایی در این دسته از ترکیب ها می‌شود. از جمله‌ی این ویژگی‌ها می‌توان به حساسیت زیاد این ترکیب ها در مقابل اثر های خارجی مانند فشار و یا میدان مغناطیسی اشاره کرد. بنابراین ترکیب‌های نیم¬رسانا با پهنای گاف کم، تحت تاثیر اثرات خارجی از جمله کشش شبکه، پتانسیل تبدیل شدن به نیم¬رسانا ها با گاف نواری بسیار کوچک را دارند. تحرک پذیری الکترون‌ها در یک نیم رسانا با گاف نواری بسیار کوچک، ۲ تا ٤ برابر بزرگتر از نیم¬رساناهای معمول است[۱]. با توجه به ویژگی‌های منحصر به فرد در ترکیبات با گاف نواری کوچک و یا صفر، انتظار می‌رود که این ترکیبات پایه الکترونیک، اپتیک و اسپینترونیک آینده را تشکیل دهند. مطالعات پیشین صورت گرفته توسط نامجو و همکاران نشان می‌دهد که آلیاژهای سه‌گانه $InAs_{0.25}Sb_{0.75}$ و $InAs_{0.75}Sb_{0.25}$ دارای پهنای گافی به ترتیب به اندازه ۰/۰۸۰ الکترون ولت و ۰/۱۹ الکترون ولت هستند [۲]. به‌دلیل داشتن پهنای گاف کوچک و همچنین برهمکنش قوی اسپین- مدار، پیش‌بینی می‌شود که تحت تاثیر اثرات خارجی مانند کشش شبکه بتوان در ساختار نواری این ترکیبات تغییرات اساسی ایجاد کرد. از جمله این تغییرات می‌توان به تبدیل کردن این ترکیب‌ها به نیم¬رسانا ها با گاف نواری صفر و ترتیب نواری وارون اشاره کرد. با توجه به کاربردهای بسیار زیاد نیمرساناهای با گاف نواری کوچک، گذار به سمت این ترکیب‌ها و همچنین بررسی ویژگی-های آن‌ها می‌تواند از اهمیت ویژه‌ای برخوردار باشد. در این مطالعه به بررسی ساختار نواری و خواص اپتیکی $InAs_{0.25}Sb_{0.75}$ و $InAs_{0.75}Sb_{0.25}$ تحت کشش شبکه و حین تبدیل شدن به نیمرساناهای با گاف نواری کوچک پرداخته می-شود.

روش و جزئیات محاسبات

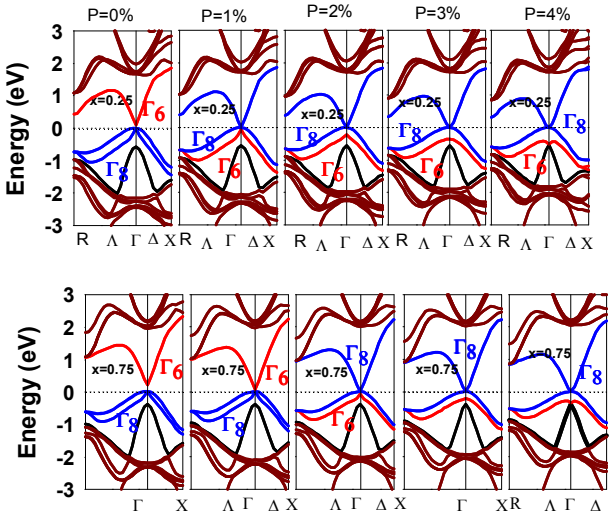
محاسبات با استفاده از کد کامپیوتری WIEN2K [۳] و بر پایه نظریه تابعی چگالی و روش امواج تخت بهساخته خطی با پتانسیل کامل (FP- LAPW) انجام شده است. پارامتر Rk_{max} (R، شعاع کوچکترین کره مافین-تین و K_{max}، بردار موج قطع برای بسط تابع موج بر حسب امواج تخت در ناحیه بین جایگاهی است) برابر ۸ و بردار موج قطع برای بسط پتانسیل و چگالی بار در ناحیه بین جایگاهی G_{max} =۱۲ انتخاب شد. محاسبه‌ها در حضور برهمکنش اسپین- مدار انجام شده است. تعداد ۷۰۰۰ نقطه k به-منظور مطالعه ویژگی‌های اپتیکی و ساختارنواری این ترکیب‌ها در نظرگرفته شده است. برای مطالعه ساختارنواری و ویژگی‌های اپتیکی ترکیب‌های $InAs_xSb_{1-x}(x=0.25, 0.5, 0.75, 1)$ از پتانسیل تبادلی همبستگی mBJLDA [٤] استفاده شده است.

نتایج

InAs و InSb نیمرساناهایی با ساختار سولفید روی هستند. آلیاژهای $InAs_xSb_{1-x}(x=0.25, 0.75)$ در حقیقت آلیاژهای شبه دوتایی هستند که در آن‌ها اتم‌های As و Sb روی زیر شبکه As/Sb قرار گرفته‌اند. در این مطالعه تنها آلیاژهای منظم در کوچکترین ابریاخته ممکن در نظر گرفته شده اند. کوچکترین ساختار منظم برای $InAs_{0.25}Sb_{0.75}$ و $InAs_{0.75}Sb_{0.25}$ یک یاخته مکعبی ساده است. در کشش هیدرواستاتیک شبکه، ثابت‌های شبکه به طور یکسان در هر سه‌راستا کشیده می‌شوند. در حالت عادی این ترکیب‌ها، نیمرساناهایی با پهنای گاف کم و نظم نواری عادی هستند. در این ترکیب‌ها با تقارن مکعبی، نوارهای رسانش بالا تبهگن دو گانه هستند (نوارهای قرمز رنگ). این نوارهای انرژی در مرکز ناحیه نخست بریلوئن دارای تقارن گروه نقطه‌ای Γ_6 هستند. همچنین نوارهای ظرفیت بالایی نوارهای تبهگن چهار-تایی هستند که در مرکز ناحیه نخست بریلوئن دارای تقارن گروه نقطه‌ای Γ_8 هستند. ترتیب نواری عادی در این‌گونه ترکیب‌ها (از انرژی بالا به سمت انرژی پایین) به ترتیب به صورت Γ_6،Γ_8، است[۵]. تحت تاثیر کشش هیدرواستاتیک، این دسته از ترکیب ها، نه تنها نظم عادی موجود در ساختار نواری خود را از دست

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

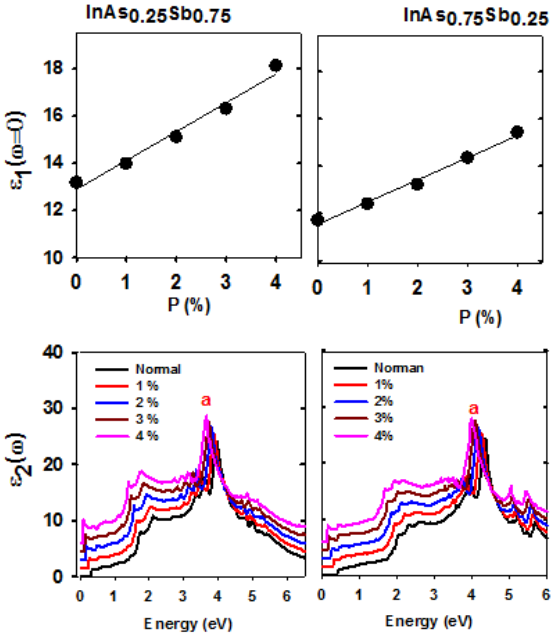
می‌دهند و در ساختار نواری آن‌ها وارونگی نواری مشاهده می‌شود بلکه گاف نواری آن‌ها هم رفته رفته کوچک می شود و سرانجام به صفر می رسد. این امر بخوبی در شکل ۱ نشان داده شده است. همانگونه که مشاهده می‌شود، تحت تاثیر کشش شبکه در بازه ۰تا ۱ درصد (۱ تا ۲ درصد) $InAs_{0.25}Sb_{0.75}$ ($InAs_{0.75}Sb_{0.25}$) به نیمرسانا با گاف نواری صفر و نظم نواری وارون تبدیل می‌شود.



شکل۱ : ساختار نواری $InAs_xSb_{1-x}$(x =0.25, 0.5) در حالت عادی و تحت کشش شبکه بین ۱ تا ٤ درصد.

در این ترکیب‌ها با تقارن مکعبی، می‌توان با اعمال کشش غیر هیدرواستاتیک و شکستن تقارن مکعبی، در ساختار نواری گاف ایجاد کرد و آن‌ها را به عایق‌های توپولوژی تبدیل کرد. در مطالعه دیگری که توسط نامجو و همکاران انجام شده است، ساختار نواری و خواص اپتیکی این ترکیب‌ها تحت تاثیر کشش غیرهیدرواستاتیک شبکه مورد بررسی قرار گرفته است [٦].

در ادامه بر پایه نتایج بدست آمده از مطالعه ساختار نواری به بررسی خواص اپتیکی $InAs_{0.25}Sb_{0.75}$ و $InAs_{0.5}Sb_{0.5}$ تحت کشش هیدرواستاتیک شبکه می‌پردازیم. برای محاسبه تابع دی-الکتریک، باید 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 فلز ها قابل‌توجه است. گذارهای بین نواری به دوسهم گذارهای مستقیم و همچنین غیرمستقیم تقسیم می‌شود. در اینجا ما از گذارهای غیر-مستقیم که شامل پراکندگی فونونی است و در واقع پیش‌بینی می-شود که این دسته از

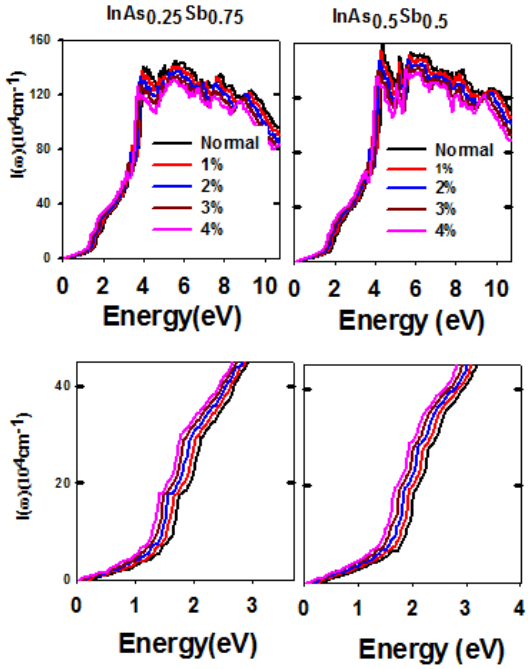


شکل۲ : (بالا) ثابت دی‌الکتریک $InAs_{0.25}Sb_{0.75}$ و $InAs_{0.75}Sb_{0.75}$ در حالت عادی و تحت کشش هیدرواستاتیک شبکه از ۱ تا ٤ درصد ، نقاط مشخص کننده مؤلفه‌های ثابت دی‌الکتریک به ترتیب با استفاده از توابع $\varepsilon(P)=12.9+1.22P$ و $\varepsilon(P)=11.5+0.94P$ **به ترتیب برای** $InAs_{0.25}Sb_{0.75}$ و $InAs_{0.75}Sb_{0.75}$برازش داده شده‌اند. (پایین) بخش موهومی تابع دی‌الکتریک (به‌منظور جلوگیری از همپوشانی، تمام طیف ها نسبت به یکدیگر به اندازه یک واحد در راستای قائم جابجا شده‌اند).

گذارها سهمی بسیار جزئی در تابع دی‌الکتریک داشته باشند چشم پوشی می‌کنیم. ثابت دی‌الکتریک استاتیک و بخش موهومی تابع دی‌الکتریک تحت کشش هیدرواستاتیک شبکه در شکل ۲ نشان داده شده اند. مطابق این شکل، ثابت دی الکتریک تحت تاثیر کشش شبکه در حال افزایش است. نقاط مشخص کننده ثابت دی-الکتریک به ازای درصدهای مختلف کشش شبکه با معادلات مرتبه نخست برازش داده شده اند. همانگونه که در شکل نشان داده شده است، ثابت دی‌الکتریک با افزایش کشش شبکه به صورت خطی افزایش می‌یابد. علت افزایش ثابت دی الکتریک با افزایش بسط شبکه را می‌توان در رفتار بخش موهومی تابع دی الکتریک تحت کشش جستجو کرد. مطابق شکل ۲ (ردیف پایین) تمام ساختارهای اصلی در بخش موهومی تابع دی الکتریک با افزایش کشش هیدرواستاتیک به سمت انرژی‌های پایین‌تر میل می‌کنند و

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

این امر منجر به افزایش ثابت دی الکتریک می شود. مرتفع‌ترین پیک در بخش موهومی تابع دی‌الکتریک با حرف "a" نشان داده شده است. مکان پیک **a برای** $InAs_{0.25}Sb_{0.75}$ ($InAs_{0.75}Sb_{0.25}$) از مقدار ۳/۹۵ الکترون ولت (٤/۳٦ الکترون ولت) در حالت عادی به ۳/۸۷ الکترون ولت (٤/۲۵ الکترون ولت) برای یک درصد کشش، ۳/۷۹ الکترون ولت (٤/۱۷ الکترون ولت) برای دو درصد کشش، ۳/۷۱ الکترون ولت (٤/۰۹ الکترون ولت) برای ۳ درصد کشش و ۳/٦۵ الکترون ولت (۳/۹۸ الکترون ولت)، برای ٤ درصد کشش می‌رسد. در ادامه به بررسی جذب اپتیکی ترکیبات $InAs_{0.25}Sb_{0.75}$ و $InAs_{0.75}Sb_{0.25}$ تحت کشش هیدرواستاتیک شبکه می‌پردازیم.



شکل۳ : (بالا) جذب اپتیکی $InAs_xSb_{1-x}(x=0.25, 0.75)$ در حالت عادی و تحت کشش شبکه بین ۱ تا ٤ درصد. (پایین) جذب اپتیکی در گستره انرژی کوچکتر.

همانگونه که در شکل ۳ آورده شده است، اضافه شدن ثابت شبکه از ۰ تا ٤ درصد، باعث بالا رفتن جذب اپتیکی تا انرژی ۳/۷ الکترون ولت برای $InAs_{0.25}Sb_{0.75}$ و ٤/۰۱ الکترون ولت برای $InAs_{0.75}Sb_{0.25}$ می‌شود. بنابراین کشش هیدرواستاتیک شبکه می‌تواند راهی برای افزایش جذب اپتیکی برای $InAs_{0.25}Sb_{0.75}$ در محدوده نور مرئی و فروسرخ باشد. این وضعیت برای $InAs_{0.75}Sb_{0.25}$ با گاف نواری بزرگتر اندکی متفاوت است. کشش شبکه، جذب اپتیکی را نه تنها در محدوده نور مرئی و فروسرخ بلکه در بخش کوچکی از منطقه فرا بنفش نیز افزایش می‌دهد. برای وضوح بیشتر، طیف جذب در گستره انرژی کوچکتری (شکل ۳، ردیف پایین) نیز نشان داده شده است.

نتیجه گیری

در این مطالعه ساختار نواری و ویژگی‌های اپتیکی ترکیب‌های $InAs_{0.25}Sb_{0.75}$ و $InAs_{0.75}Sb_{0.25}$ تحت کشش هیدرواستاتیک شبکه مورد بررسی قرار گرفته است. مطابق نتایج بدست آمده تحت بسط هیدرواستاتیک شبکه، $InAs_{0.25}Sb_{0.75}$ و $InAs_{0.75}Sb_{0.25}$ با نظم نواری عادی به نیم‌رساناها با گاف نواری صفر و ترتیب نواری وارون تبدیل می‌شود. نتایج بدست آمده از بررسی خواص اپتیکی این ترکیب‌ها با بکارگیری تقریب فاز تصادفی نشان می‌دهد با افزایش بسط شبکه و انتقال از نیم‌رسانای معمول به سمت نیم‌رساناها با پهنای گاف صفر و نظم نواری وارون، ساختارهای اصلی در بخش موهومی تابع دی‌الکتریک به سمت انرژی‌های پایین‌تر میل می‌کنند. همچنین افزایش کشش شبکه باعث افزایش جذب اپتیکی در ناحیه نور مرئی و فروسرخ می‌شود. از آنجا که نیم‌رساناها با گاف نواری صفر می‌توانند در ابزارهای اپتو- الکترونیکی بسیار مفید باشند، بنابراین مطالعه صورت گرفته در این پژوهش می‌تواند مبنای کارهای تجربی‌ای که در آینده در راستای بررسی ویژگی‌های اپتیکی این ترکیب‌ها انجام می‌شود، قرار گیرد.

مرجع‌ها

[۱] T . McGill and D . Collins, "Prospects for the future of narrow bandgap materials", *Semiconductor Science and Technology* **8**, (1993) S1.
[۲] S. Namjoo et al., " *Optical study of narrow band gap $InAs_xSb_{1-x}$ (x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1)", Physical Review* B **91**, (2015) 205205.
[۳] P. Blaha etal., *"WIEN2k, An Augmented Plane Wave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties,"* **2th** Edition, Vienna University of Technology, Vienna, (2001).
[۴] F. Tran, and P. Blaha, *"Accurate Band Gaps of semiconductors and Insulators with a Semilocal Exchange-Correlation Potential "*, *Physical Review Letters* **102**, (2009) 226401.
[۵] N. Peyghambarian, S. W. Koch, and A. Mysyrowicz, *Introduction to semiconductor optics* (Prentice-Hall, Inc., 1993)
[۶] S. Namjoo and P. Puschnig, "Optical properties of InAs, InSb and $InAs_xSb_{1-x}$ (x=0.25, 0.5, 0.75) alloys under strain)", *Computational Condensed Matter* **30,** (2022) e00610.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی خواص ساختاری $NdNiO_2$ با استفاده از روش DFT+U

حجت اله، مختاری باغ‌ابریشمی؛ پیمان، صاحب‌سرا

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

چکیده

اخیراً ابررسانایی دمای بالا در یک ترکیب نیکل‌دار توسط گروه لی و همکاران اعلام شده است [۱]. در کار حاضر سعی شده است برخی خواص الکترونی ترکیب نیکلاتی $NdNiO_2$ به طور مقدماتی بررسی شود. از آنجایی که نیکل دارای اوربیتال نیمه‌پر d است، پس اثرات همبستگی مهم خواهد بود. به همین دلیل از روش DFT+U برای محاسبات استفاده شده است. اوربیتال‌های d اتم‌های نیکل و نئودیوم سهم قابل توجهی در نوارهایی که تراز فرمی را قطع می‌کنند دارند. بنابراین این اوربیتال‌ها در خواص مبتنی بر فیزیک کم انرژی بسیار تعیین کننده هستند. همچنین میزان اشغال الکترونی اوربیتال‌های مختلف، توافق خوبی با محاسبات دیگران دارند.

واژه‌های کلیدی: نظریه تابعی چگالی+U، مواد همبسته، فیزیک کم انرژی

Study of the structural properties of $NdNiO_2$, using DFT+U

H. Mokhtari Baghabrishami; P. Sahebsara

Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan

Abstract

High-temperature superconductivity in a layered nickel oxide, has been reported by Lee et al. recently. In the present work, some electronic properties of the nickelate compound $NdNiO_2$ have been investigated. Since nickel has an open d orbital, the correlation effects are significant. Therefore, the DFT + U method is used for calculating structural properties of the system. The d orbitals of nickel and neodymium atoms make a significant contribution to the bands that cross the Fermi level. Therefore, these orbitals are very important in low energy properties of nickelates. Moreover, the electron occupancy of different orbitals is in a good agreement with the calculations in literature.

Keywords: density functional theory + U, correlated materials, low energy physics

مقدمه

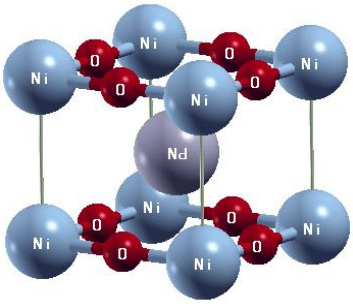
ساختارهای لایه‌ای کوپرات‌ها، به دلیل خواص فیزیکی جالبی که از خود نشان می‌دهند، در طول چند دهه بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند [۲و۳]. از جمله این ویژگی‌ها می‌توان به دمای گذار بالا به فاز ابررسانا و همچنین تنوع نظم بلندبرد و کوتاه برد این دسته از مواد اشاره کرد. حضور اوربیتال d در لایه ظرفیت اتم مس باعث می‌شود که این ساختارهای لایه‌ای در زمره مواد همبسته قوی قرار بگیرند. اما اخیراً با کشف

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

ابررسانایی در یک ساختار از اکسیدهای لایه‌ای نیکل [۱] و همچنین به دلیل این که این ترکیب‌های نیکلاتی با ترکیبات کوپراتی مذکور هم‌ساختار هستند، مطالعه این دسته از مواد توجه زیادی را به خود جلب کرده است [۸-۴]. از آنجایی که در جدول تناوبی عناصر، نیکل در مجاورت مس بوده و دارای یک الکترون کمتر نسبت به مس است، در این ساختار هم ردپای اوربیتال d به چشم می‌خورد و بنابراین ساختارهای لایه‌ای نیکلات هم در دسته مواد همبسته قوی قرار می‌گیرند. برای بررسی دقیق‌تر مواد همبسته قوی، باید از روش‌هایی فراتر از روش‌های مبتنی بر نظریه نواری استفاده کرد. روش DFT+U یکی از روش‌هایی است که با در نظر گرفتن پارامتر U هابارد، پیش‌بینی‌های نظریه تابعی چگالی را بهبود می‌بخشد [۹].

ساختار $NdNiO_2$

ترکیب نیکلاتی $NdNiO_2$ در ساختار تتراگونال بلوری می‌شود. صفحات NiO_2 بوسیله صفحات متشکل از اتم‌های نئودیوم از یکدیگر جدا شده‌اند (شکل ۱). این ترکیب رفتاری فلزگونه از خود نشان می‌دهد. بدین صورت که مقاومت با کاهش دما تا حدود ۱۰۰ کلوین کاهش می‌یابد. با ادامه کاهش دما، مقاومت به صورت لگاریتمی افزایش می‌یابد. این رفتار نشان دهنده اثر کوندو است. این اثر معمولاً با حضور یک ناخالصی مغناطیسی در فلزات مشاهده می‌شود [10]. تفاوت بسیار مهمی که این ساختار با ساختار مشابه کوپراتی خود دارد این است که اوربیتال d اتم نئودیوم هم در فیزیک کم انرژی سهم دارد و برخلاف ساختار کوپراتی، عملاً با یک سامانه ۳ بعدی سروکار داریم. بنابراین انتظار می‌رود که با وجود شباهت‌هایی که در ظاهر بین این دو ساختار وجود دارد، تفاوت‌های اساسی، به خصوص در



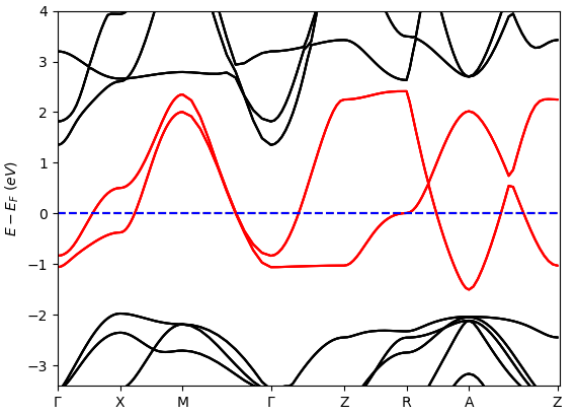
شکل ۱ ساختار بلوری تتراگونال $NdNiO_2$

روش‌های مورد استفاده در مطالعه این ساختارها، وجود داشته باشد. یکی دیگر از تفاوت‌های بین دو ساختار مذکور، انرژی جدایی بین اوربیتال‌های 2p اکسیژن و اوربیتال 3d اتم واسطه است. همین مسئله ممکن است توجیهی برای اختلاف دمای گذار ابررسانایی مربوط به دو ترکیب در حالت آلایشی باشد.

روش DFT+U

نظریه تابعی چگالی برای توصیف حالت پایه، از تقریب‌هایی مثل تقریب چگالی موضعی (LDA) یا تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) استفاده می‌کند. اما در هر صورت این تقریب‌ها خطاهایی به دنبال دارند. مخصوصاً وقتی سامانه مورد نظر شامل اتم‌هایی باشد که اوربیتال‌های نیمه پر f یا d دارند، این خطاها بیشتر می‌شوند. یکی از معروف‌ترین مثال‌ها در مورد نقص نظریه تابعی چگالی، مربوط به عایق‌های مات می‌شود. در این موارد برهمکنش کولنی نقش مهمی در نحوه رفتار سامانه دارد. در واقع نظریه نواری برای توضیح پدیده‌هایی همچون عایق مات که نقش همبستگی الکترونی در آن بسیار پر رنگ است، خوب عمل نمی‌کند. یکی از روش‌هایی که برای بهبود توصیف حالت پایه سامانه‌های همبسته استفاده می‌شود، DFT+U است. این روش با الهام گرفتن از مدل هابارد سعی دارد که اثرات مربوط به برهمکنش کولنی را در نظر بگیرد. در واقع با اضافه کردن پارامتر U هابارد در قالب

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل ۲ ساختار نواری ترکیب $NdNiO_2$ برای یک مسیر پرتقارن و در مجاورت تراز فرمی.

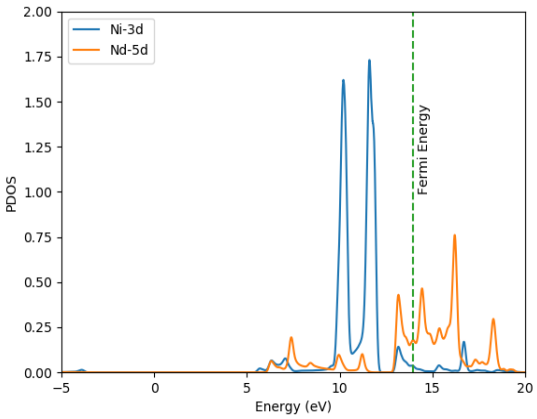
یک جمله هابارد‌گونه به هامیلتونی، فیزیک اوربیتال‌های جایگزیده d و f بهتر توصیف می‌شود. به این ترتیب تابعی انرژی به این صورت خواهد شد:

$$E_{\mathrm{DFT+U}}[n(\mathbf{r})] = E_{\mathrm{DFT}}[n(\mathbf{r})] + E_U[n(\mathbf{r})] - E_{\mathrm{dc}} \quad (۱)$$

در رابطه (۱) $n(\mathbf{r})$ چگالی الکترونی، E_{DFT} سهم انرژی به دست آمده با استفاده تقریب مربوطه، E_U انرژی هابارد‌گونه و E_{dc} تصحیح دوبارشماری انرژی است. باید توجه داشت که تصحیح U هابارد فقط به حالت‌های جایگزیده سامانه که اثرات همبستگی در آن مهم‌تر است اعمال می‌شود.

محاسبات و نتایج

در این کار، محاسبات ابتدا به ساکن با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو و با استفاده از روش DFT+U انجام شده است. پارامترهای مربوط به شبکه تتراگونال با توجه به یک مطالعه تجربی [۱] به صورت a=b=3.92Å و c=3.31Å انتخاب شده‌اند. همچنین از شبه پتانسیل‌های فوق نرم استفاده شده است.



شکل ۳ چگالی حالات جزئی برای اوربیتال‌های 3d و 5d اتم‌های نیکل و نئودیوم.

در گام اول به محاسبه ساختار نواری $NdNiO_2$ پرداخته شد. بخشی از ساختار نواری به دست آمده را می‌توان در شکل ۲ مشاهده کرد. رفتار نوارهایی که در نزدیکی سطح فرمی قرار دارند با نتایج محاسبات به دست آمده با روش‌های مبتنی بر توابع وانیر سازگاری خوبی دارند [۱۱]. همان طور که اشاره شد اوربیتال‌هایی که سهم بیشتری در نوارهایی گذرنده از تراز فرمی دارند، در بررسی فیزیک کم انرژی اهمیت دارند. وقتی اوربیتال‌های d در این نوارهای مجاور تراز فرمی سهم عمده‌ای داشته باشند، مسئله مهم‌تر می‌شود. زیرا برای ساختن فضایی که محاسبات DMFT در آن انجام خواهد شد، باید حتما این اوربیتال‌ها در نظر گرفته شوند. به همین دلیل به بررسی چگالی حالات جزئی مربوط به اوربیتال‌های d پرداخته شده است. این چگالی حالات جزئی در شکل ۳ آورده شده است. مشاهده می‌شود که اوربیتال‌های 3d نیکل و 5d نئودیوم سهم قابل توجهی در نزدیکی سطح فرمی دارند.

در مرحله بعدی به بررسی میزان اشغال اوربیتال‌های اتم‌های نیکل و نئودیوم پرداخته شده است. این اطلاعات در جدول‌های ۱ و ۲ آورده شده است. برای اتم نیکل میزان

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

جدول ۱ میزان اشغال اوربیتال‌های اتم نیکل.

s	p_x	p_y	p_z	d_{tot}	d_{xy}	d_{xz}	d_{yz}	d_{z^2}	$d_{x^2-y^2}$
۲٫۳۰۸	۱٫۹۹۸	۱٫۹۹۸	۱٫۹۹۹	۹٫۱۳۷	۱٫۹۶۶	۱٫۹۵۸	۱٫۹۵۸	۱٫۸۶۲	۱٫۳۹۳

جدول ۲ میزان اشغال اوربیتال‌های اتم نئودیوم.

s	p_x	p_y	p_z	d_{tot}	d_{xy}	d_{xz}	d_{yz}	d_{z^2}	$d_{x^2-y^2}$
۲٫۲۲۶	۲٫۲۰۵	۲٫۲۰۵	۲٫۲۱۹	۱٫۹۵۳	۰٫۴۱۶	۰٫۳۴۸	۰٫۳۴۸	۰٫۵۱۷	۰٫۳۲۴

اشغال اوربیتال d بیشتر از ۹ پیش‌بینی شده است. این مسئله به هیبریدشدگی این اوربیتال با سایر اوربیتال‌ها مربوط می‌شود. همین نکته را می‌توان در مورد اوربیتال d اتم نئودیوم مشاهده کرد. نتایج به دست آمده برای عدد اشغال اوربیتال‌ها با نتایج موجود [۵] هم‌خوانی دارند.

مراجع

[۱] D. Li, K. Lee, B. Y. Wang, M. Osada, S. Crossley, H. R. Lee, Y. Cui, Y. Hikita, and H. Y. Hwang, *Nature* (London) **572** (2019) 624.

[۲] W. E. Pickett, *Rev. Mod. Phys.* **61** (1989) 433.

[۳] B. Keimer, S. A. Kivelson, M. R. Norman, S. Uchida, and J. Zaanen, *Nature* (London) 518 (2015) 179.

[۴] J. Karp, A. S. Botana, M. R. Norman, H. Park, M. Zingl, and A. Millis, *Physical Review* X **10** (2020) 021061.

[۵] J. Karp, A. Hampel, and A. J. Millis, *Physical Review* B **103**, 19 (2021) 195101.

[۶] C.-J. Kang and G. Kotliar, *Physical Review Letters* **126** (2021) 127401.

[۷] S. Ryee, H. Yoon, T. J. Kim, M. Y. Jeong, and M. J. Han, Physical *Review* B **101**, (2020) 064513.

[۸] Y. Wang, C.-J. Kang, H. Miao, and G. Kotliar, *Physical Review* B, **102** (2020) 161118.

[۹] M. Cococcioni, Modeling and Simulation **2,** Forschungszentrum Julich, Germany. (2012).

[۱۰] W. E. Pickett, *Nature Reviews Physics* **3** (2021) 7-8.

[۱۱] Z. Liu, Z. Ren, and W. Zhu, Z. Wang, and J. Yang, *npj Quantum Materials*, 2 (2020) 1-8.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تولید درهم‌تنیدگی پایدار فونون-فونون در دو سامانه اپتومکانیکی اتلاف‌گر دور از هم با جفت‌شدگی مرتبه دوم

رفیعی، مهران ؛ توسلی، محمد کاظم

گروه اپتیک و لیزر، دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد

چکیده

در این مقاله روشی را برای تولید درهم‌تنیدگی مکانیکی (ماکروسکوپی) پایدار در دو سامانه اپتومکانیکی دور از هم با جفت‌شدگی مرتبه دوم فوتون-فونون، به کمک اندازه‌گیری یک حالت بِل معرفی می کنیم. دو زیرسامانه اپتومکانیکی کاملا یکسان و مستقل از هم هستند و هر کدام شامل یک کاواک با آینه متحرک و یک اتم دوترازی است، که توسط یک میدان پمپ خارجی و یک میدان کلاسیکی کنترل می شود. به منظور بررسی دینامیک سامانه، ابتدا با انتخاب مناسب بسامدهای اجزای مختلف آن، هامیلتونی در تصویر برهم‌کنش را بدست می آوریم. سپس با در نظر گرفتن شرایط تشدید و با استفاده از تقریب موج چرخان (RWA) هامیلتونی موثر محاسبه می‌شود. با در نظر گرفتن اتلاف‌های اتمی، فوتونی و فونونی و با حل تحلیلی معادله شرودینگر وابسته به زمان، تحول زمانی هر یک از زیرسامانه‌ها (که دارای سه‌جزء است) و همچنین سامانه کلی بدست آمده است. با اندازه گیری یک حالت بِل مناسب (متشکل از مُدهای اپتیکی) بر روی حالت کلی سامانه، درهم‌تنیدگی میان دومُد مکانیکی ایجاد می شود. محاسبه سنجه تلاقی، به ازای مقادیر جفت‌شدگی‌ها و اتلاف‌های معین نشان می‌دهد که می توان به درهم‌تنیدگی قابل‌توجه و پایداری دست یافت.

واژه های کلیدی: *اندازه‌گیری حالت بِل، پایداری درهم‌تنیدگی، سامانه‌های اپتومکانیکی اتلاف‌گر، جفت شدگی مرتبه دوم اپتومکانیکی.*

Generation of stable phonon-phonon entanglement in two distant dissipative optomechanical systems with quadratic coupling

Rafeie, Mehran; Tavassoly, Mohammad Kazem

Laser and Optics Group, Faculty of Physics, Yazd University

Abstract

In this paper, we introduce a method for generating stable mechanical (macroscopic) entanglement in two remote optomechanical systems with quadratic photon-phonon coupling by using of Bell-state measurement. The two optomechanical subsystems are identical exactly and independent of each other, and each consists of a cavity with a movable mirror as well as a two-level atom, which is driven by an external pump field and a classical field. In order to investigate the dynamics of the system, we first obtain the Hamiltonian in the interaction picture by choosing suitable frequencies of its different components, then by considering the resonance conditions and using the rotating wave approximation (RWA) the effective Hamiltonian is calculated. By considering atomic, photonic, and phononic dissipations, and by the analytical solution of the time-dependent Schrödinger equation, the time evolution of each subsystem (with three components), as well as the total system, has been obtained. By applying a suitable Bell state measurement (comprising of optical modes) on the total state of the system, entanglement between the two mechanical modes is created. Calculating the concurrence for certain coupling and dissipations values indicates that a significant and stable degree of entanglement can be achieved.

Keywords: *Bell-state measurement, Dissipative optomechanical systems, Entanglement stability, Optomechanical quadratic coupling.*

PACS No. *32*

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مقدمه

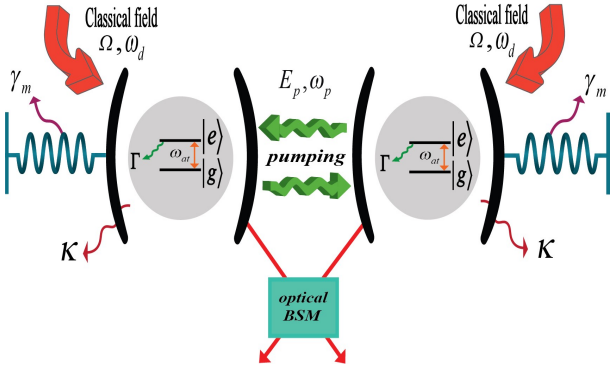
درهم‌تنیدگی یکی از ویژگی‌های مهم مکانیک کوانتومی است که نقش مهمی در اطلاعات و محاسبات کوانتومی [۱] و کامپیوترهای کوانتومی [۲] ایفا می‌کند. به همین خاطر بخش قابل توجهی از پژوهش‌های جدید که در حوزه فناوری‌های اطلاعات کوانتومی مورد استفاده نظری و تجربی قرار می‌گیرد، متمرکز بر تولید و اندازه‌گیری درهم‌تنیدگی در سامانه‌های برهم‌کنشی اتم-میدان است. تا کنون تلاش‌های زیادی برای تولید درهم‌تنیدگی در سامانه‌های مختلف فیزیکی انجام شده است. در همین راستا، در یک دهه اخیر روش‌هایی برای تولید درهم‌تنیدگی در سامانه‌های اپتومکانیکی مورد مطالعه قرار گرفته است [۳،۴] . در این سامانه‌ها از برهم‌کنش یک نوسانگر مکانیکی (آینه متحرک) و فشار تابشی کاواک اپتومکانیکی برای تولید درهم‌تنیدگی ماکروسکوپیک استفاده می‌شود. نویسندگان در مرجع [۴] با در نظر گرفتن جفت‌شدگی مرتبه اول و با در نظر گرفتن حالت اولیه همدوس اتمی، درهم‌تنیدگی فونون-فونون را با عناصر ماتریس چگالی کاهش‌یافته سامانه بعد از اندازه‌گیری حالت بِل را بررسی کرده‌اند. در دو مرجع اخیر درهم‌تنیدگی در سامانه‌های اپتومکانیکی با در نظر گرفتن جفت‌شدگی خطی بحث شده است. تعمیم دیگری از سامانه‌های اپتومکانیکی، سامانه‌های اپتومکانیکی با جفت‌شدگی مرتبه دوم (غیرخطی) است. نشان داده شده است که اگر این ضریب جفت‌شدگی به اندازه کافی قوی باشد منجر به گیراندازی فوتونی و همچنین منجر به آشکارسازی نویزهای ناشی از فشار تابشی می‌شود [۵،۶].

مدل سامانه و اندازه‌گیری درهم‌تنیدگی

سامانه کلی مدل ما متشکل از دو زیرسامانه اپتومکانیکی یکسان که هر کدام شامل یک کاواک تک‌مُد با یک آینه متحرک است. هر کدام از کاواک‌های اپتومکانیکی به وسیله یک میدان پمپ خارجی با بسامد ω_p و دامنه E_P و یک میدان کلاسیکی با بسامد ω_d و دامنه Ω کنترل می‌شوند. در هر زیرسامانه، یک اتم دوترازی با بسامد گذار ω_{at} و آهنگ واپاشی Γ، یک میدان اپتیکی تک‌مُد با بسامد ω_c و آهنگ اتلاف κ وجود دارد. آینه متحرک به صورت یک نوسانگر هماهنگ با بسامد ω_m و آهنگ میرایی γ_m درنظر گرفته شده است. هامیلتونی هر زیرسامانه به صورت زیر معرفی می‌شود:

$$\hat{H} = \omega_c \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{\omega_{at}}{2}\hat{\sigma}_z + \omega_m \hat{b}^\dagger \hat{b} + \Lambda \hat{a}^\dagger \hat{a}(\hat{b}+\hat{b}^\dagger) + g_0 \hat{a}^\dagger \hat{a}(\hat{b}+\hat{b}^\dagger)^2 + G(\hat{a}\hat{\sigma}_+ + \hat{a}^\dagger \hat{\sigma}_-) + \Omega(\hat{\sigma}_- e^{i\omega_d t} + \hat{\sigma}_+ e^{-i\omega_d t}) + E_p(\hat{a}e^{i\omega_p t} + \hat{a}^\dagger e^{-i\omega_p t}), \quad (۱)$$

که در آن $\hat{a}$ ($\hat{a}^\dagger$) و $\hat{b}$ ($\hat{b}^\dagger$) به ترتیب عملگرهای نابودی (خلق) مُدهای اپتیکی و مکانیکی، $\hat{\sigma}_+, \hat{\sigma}_-$ و $\hat{\sigma}_z$ عملگرهای اتمی، Λ ,g_0 ,Ω ,G و E_p به ترتیب ضریب جفت‌شدگی خطی میان مُد اپتیکی و مکانیکی، ضریب جفت‌شدگی اپتومکانیکی مرتبه دوم، دامنه پمپ اتمی، جفت‌شدگی اتم-میدان و دامنه پمپ کاواک می‌باشند. جمله $g_0 \hat{a}^\dagger \hat{a}(\hat{b}+\hat{b}^\dagger)^2$ در رابطه (۱) نشان‌دهندی جفت‌شدگی مرتبه دوم با قدرت g_0 بین مُدهای اپتیکی و مکانیکی می‌باشد، که علی‌الاصول ضریب جفت‌شدگی مرتبه دوم (g_0) از ضریب جفت‌شدگی خطی (Λ) باید کوچکتر باشد ($g_0 < \Lambda$). ω_c ,ω_{at} ,ω_m ,ω_d و ω_p به ترتیب بسامدهای میدان کوانتیده تک‌مُد، گذار اتمی، مُد فونونی، پمپ اتمی و پمپ فوتونی هستند.



شکل ۱: مدل سامانه شامل دو کاواک اپتومکانیکی اتلاف‌گر همراه با آینه متحرک که هر کدام شامل یک اتم دوترازی است و با یک میدان پمپ خارجی و یک میدان کلاسیکی کنترل می‌شوند.

به کمک عملگر یکانی $R(t) = e^{i\hat{H}_0 t}$ که $\hat{H}_0 = \omega_c \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{\omega_{at}}{2}\hat{\sigma}_z + \omega_m \hat{b}^\dagger \hat{b}$ هامیلتونی آزاد هر زیرسامانه است، هامیلتونی برهم‌کنش در تصویر برهم‌کنش مشخص می‌شود:

$$\hat{H}_I = \hat{R}(t)\hat{H}\hat{R}^\dagger(t) - i\hat{R}(t)\frac{\partial}{\partial t}\hat{R}^\dagger(t). \quad (۲)$$

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

با استفاده از هامیلتونی برهم‌کنش در تصویر برهم‌کنش (۲) و با در نظر گرفتن تقریب موج چرخان (RWA) و به کمک روش روش ارائه شده در مرجع [۷] (که روش coarse-grained نام دارد) و با در نظر گرفتن شرایط تشدید $\omega_p = \omega_{at} = \omega_m$، $2\omega_m = \omega_d + \omega_c$ می‌توان هامیلتونی موثر را به‌صورت زیر بدست آورد:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{eff} &= g_0\hat{a}^\dagger\hat{a}(2\hat{b}^\dagger\hat{b}+1)-\frac{\Lambda^2}{\omega_m}(\hat{a}^\dagger\hat{a})^2+\frac{\Omega^2}{\omega_m}\hat{\sigma}_z \\ &-\frac{\Lambda G}{\omega_m}\left(\hat{a}^\dagger\hat{b}\hat{\sigma}_- + \hat{a}\hat{b}^\dagger\hat{\sigma}_+\right)-\frac{\Lambda E_p}{\omega_m}\left(\hat{a}^\dagger\hat{b}+\hat{a}\hat{b}^\dagger\right) \\ &-\frac{G^2}{\omega_m}\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{\sigma}_z+\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-\right)-\frac{GE_P}{\omega_m}(\hat{\sigma}_- - \hat{\sigma}_+),\end{aligned} \quad (۳)$$

برای بررسی واقعی‌تر سامانه اتلاف‌های اتمی، فوتونی و فونونی را با رویکرد پدیده‌شناسی، به هامیلتونی موثر (۳) اضافه می‌کنیم [۸,۹]:

$$\hat{H}'_{eff} = \hat{H}_{eff} - \frac{i\Gamma}{2}\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_- - \frac{i\kappa}{2}\hat{a}^\dagger\hat{a} - \frac{i\gamma_m}{2}\hat{b}^\dagger\hat{b}. \quad (۴)$$

با درنظر گرفتن حالت اولیه هر زیرسامانه به‌صورت زیر:

$$|\psi(0)\rangle = \left(\cos\theta|e\rangle + \sin\theta|g\rangle\right)\otimes|1_f, 0_m\rangle, \quad (۵)$$

و با استفاده از معادله شرودینگر وابسته به زمان، کت حالت وابسته به زمانِ سه‌جزئی هر زیرسامانه و هم‌چنین حالت کلی سامانه به ترتیب به‌صورت زیر بدست می‌آید:

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle_1 &= m_1|1_{f_1}, 0_{m_1}, e_1\rangle + m_2|1_{f_1}, 0_{m_1}, g_1\rangle \\ &+ m_3|0_{f_1}, 1_{m_1}, e_1\rangle + m_4|0_{f_1}, 1_{m_1}, g_1\rangle, \\ |\psi(t)\rangle_2 &= m'_1|1_{f_2}, 0_{m_2}, e_2\rangle + m'_2|1_{f_2}, 0_{m_2}, g_2\rangle \\ &+ m'_3|0_{f_2}, 1_{m_2}, e_2\rangle + m'_4|0_{f_2}, 1_{m_2}, g_2\rangle, \\ |\Psi(t)\rangle &= |\psi(t)\rangle_1 \otimes |\psi(t)\rangle_2.\end{aligned} \quad (۶)$$

بدلیل پیچیده بودن رابطه (۶) از بیان شکل صریح آن‌ها صرف نظر می‌کنیم. حال برای ایجاد درهم‌تنیدگی مکانیکی مورد نظر، حالت بِل اپتیکی زیر را معرفی می‌کنیم [۴]:

$$|\phi\rangle_{f_1,f_2} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0_{f_1}, 0_{f_2}\rangle - |1_{f_1}, 1_{f_2}\rangle\right). \quad (۷)$$

روش اندازه‌گیری حالت بِل به‌صورت کنش عملگر تصویر ساخته شده با حالت بِل روی حالت کلی سامانه به‌صورت زیر می‌شود:

$$|\phi\rangle_{f_1,f_2}\langle\phi|\Psi(t)\rangle = |\phi\rangle_{f_1,f_2}\otimes|\psi_p\rangle, \quad (۸)$$

که $|\psi_p\rangle$ با رابطه زیر تعریف شده است:

$$\begin{aligned}|\psi_p\rangle &= B_1|1_{m_1}, 1_{m_2}, e_1, e_2\rangle + B_2|1_{m_1}, 1_{m_2}, e_1, g_2\rangle \\ &+ B_3|1_{m_1}, 1_{m_2}, g_1, e_2\rangle + B_4|1_{m_1}, 1_{m_2}, g_1, g_2\rangle \\ &+ B_5|0_{m_1}, 0_{m_2}, e_1, e_2\rangle + B_6|0_{m_1}, 0_{m_2}, e_1, g_2\rangle \\ &+ B_7|0_{m_1}, 0_{m_2}, g_1, e_2\rangle + B_8|0_{m_1}, 0_{m_2}, g_1, g_2\rangle,\end{aligned} \quad (۹)$$

که در آن ضرایب وابسته به زمان $B_i(t)(i=1,\ldots,8)$ بصورت زیر هستند (وابستگی زمانی آن‌ها برای سادگی روابط نوشته نشده است):

$$\begin{aligned}&B_1 = \frac{m_3m'_3}{\sqrt{2}},\ B_2 = \frac{m_3m'_4}{\sqrt{2}},\ B_3 = \frac{m_4m'_3}{\sqrt{2}},\ B_4 = \frac{m_4m'_4}{\sqrt{2}}, \\ &B_5 = -\frac{m_1m'_1}{\sqrt{2}},\ B_6 = -\frac{m_1m'_2}{\sqrt{2}},\ B_7 = -\frac{m_2m'_1}{\sqrt{2}},\ B_8 = -\frac{m_2m'_2}{\sqrt{2}}.\end{aligned} \quad (۱۰)$$

حال با استفاده از $|\psi_p\rangle$ در (۹) ماتریس چگالی را به‌صورت زیر می‌نویسیم:

$$\hat{\rho} = \frac{|\psi_p\rangle\langle\psi_p|}{Tr\left(|\psi_p\rangle\langle\psi_p|\right)}. \quad (۱۱)$$

با گرفتن رَد روی اتم‌های ۱ و ۲ و به کمک پایه‌های $|1_{m_1}, 1_{m_2}\rangle$، $|1_{m_1}, 0_{m_2}\rangle$، $|0_{m_1}, 1_{m_2}\rangle$ و $|0_{m_1}, 0_{m_2}\rangle$ می‌توان ماتریس چگالی کاهش‌یافته برای دومُد مکانیکی از دو زیرسامانه را بدست آورد:

$$\rho_{m_1,m_2}(t) = \frac{1}{Tr\left(|\psi_p\rangle\langle\psi_p|\right)}\begin{pmatrix}\Sigma_1(t) & 0 & 0 & \Sigma_2(t)\\ 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\\ \Sigma_3(t) & 0 & 0 & \Sigma_4(t)\end{pmatrix}, \quad (۱۲)$$

که عناصر ماتریس نیز در زیر آمده است:

$$\begin{aligned}\Sigma_1(t) &= |B_1|^2 + |B_2|^2 + |B_3|^2 + |B_4|^2 \\ \Sigma_2(t) &= B_1B_5^* + B_2B_6^* + B_3B_7^* + B_4B_8^* \\ \Sigma_3(t) &= B_5B_1^* + B_6B_2^* + B_7B_3^* + B_8B_4^* \\ \Sigma_4(t) &= |B_5|^2 + |B_6|^2 + |B_7|^2 + |B_8|^2.\end{aligned} \quad (۱۳)$$

در ادامه سنجه تلاقی را برای ارزیابی میزان درهم‌تنیدگی میان مُدهای مکانیکی محاسبه می‌کنیم، که با رابطه زیر مشخص می‌شود:

$$C(t) = Max\left(0, \sqrt{\lambda_1} - \sqrt{\lambda_2} - \sqrt{\lambda_3} - \sqrt{\lambda_4}\right). \quad (۱۴)$$

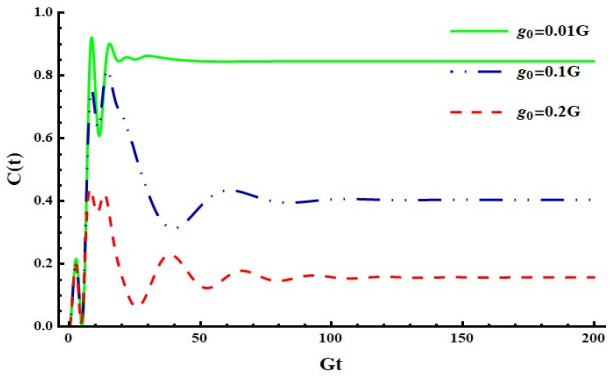
در این رابطه $\lambda_i(i=1,\cdots,4)$ ویژه‌مقادیر ماتریس زیر هستند، که به‌ترتیب کاهشی نوشته شده است:

$$\hat{\rho}_{m_1,m_2}\left(\hat{\sigma}_y\otimes\hat{\sigma}_y\right)\hat{\rho}^*_{m_1,m_2}\left(\hat{\sigma}_y\otimes\hat{\sigma}_y\right), \quad (۱۵)$$

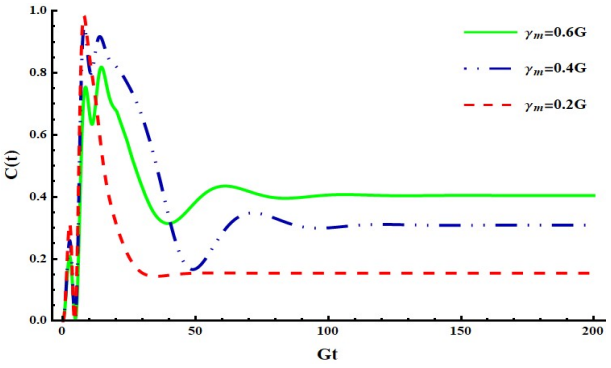
که $\hat{\sigma}_y$ ماتریس پائولی می‌باشد. در ادامه نمودارهای تلاقی بین دومُد مکانیکی برحسب زمان بهنجار شده Gt در شکل‌های ۴-۲

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

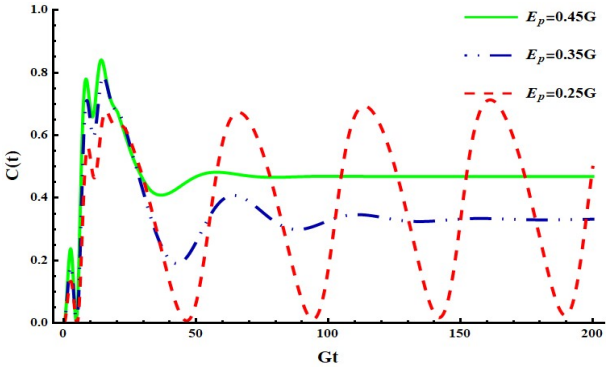
رسم شده است که به علت کمبود جا فقط به ذکر پارامترها در هر شکل بسنده کردیم. در تمام شکل‌های ۴-۲ پارامترهای $\omega_m = 5G$,$\Omega = 0.2G$,$\theta = \frac{\pi}{4}$,$\Lambda = 1.2G$,$\Gamma = 0.6G$ و $\kappa = 0.5G$ یکسان انتخاب شده است.



شکل ۲: $E_p = 0.4G, \gamma_m = 0.6G$.



شکل ۳: $E_p = 0.4G, g_0 = 0.1G$.



شکل ۴: $g_0 = 0.1G, \gamma_m = 0.6G$.

بحث و نتیجه‌گیری

در این بخش شرایط مناسب برای دست‌یابی به میزان درهم‌تنیدگی بالا و پایدار، با تغییر پارامترهای ضریب جفت‌شدگی مرتبه دوم (g_0)، اتلاف فونونی (γ_m) و دامنه پمپ میدان خارجی (E_p) مورد بررسی قرار گرفته است. در شکل ۲ سنجه تلاقی به ازای ضریب جفت‌شدگی مرتبه دوم $g_0 = (0.01, 0.1, 0.2)G$ رسم شده است. مشاهده می‌کنیم که با کاهش این ضریب میزان درهم‌تنیدگی پایدار $C(t) \simeq 0.85$ قابل دسترس است. در شکل ۳ اثر اتلاف فونونی بررسی شده است. مشاهده می‌کنیم که با افزایش اتلاف فونونی از $\gamma_m = 0.2G$ تا $\gamma_m = 0.6G$ میزان درهم‌تنیدگی تقریبا ۰/۲ بهبود یافته است و تقریبا بعد از گذشت ۸۰ واحد از زمان بهنجار شده به درهم‌تنیدگی پایدار $C(t) \simeq 0.4$ دست می‌یابیم. در شکل ۴ مشاهده می‌کنیم که سنجه تلاقی به ازای دامنه‌های پمپ $E_p = (0.25, 0.35, 0.45)G$ رسم شده است، با افزایش دامنه پمپ از میزان افت‌وخیزهای درهم‌تنیدگی کاسته شده است و تقریبا بعد از گذشت ۷۰ واحد از زمان بهنجار شده درهم‌تنیدگی پایدار $C(t) \simeq 0.45$ قابل دسترس است. نتایج بدست آمده نشان دهنده این است که ضریب جفت‌شدگی مرتبه دوم نقش مخربی بر میزان درهم‌تنیدگی دارد و در مورد اتلاف فونونی بر خلاف بسیاری از موارد که اتلاف نقش مخربی بر سامانه دارد [۱۰]، اما در مدل ما اتلاف می‌تواند نقش مثبتی بر میزان و پایداری درهم‌تنیدگی داشته باشد.

مرجع‌ها

[۱] R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, and K. Horodecki; "*Quantum Entanglement*"; Rev. Mod. Phys. **81,** (2009) 865.
[۲] L. Gyongyosi, and S. Imre; "*A Survey on Quantum Computing Technology*"; Comput. Sci. Rev. **31,** (2019) 51.
[۳] M. Hassani Nadiki, and M. K. Tavassoly; "*The Amplitude of the Cavity Pump Field and Dissipation Effects on the Entanglement Dynamics and Statistical Properties of an Optomechanical System*"; Opt. Commun. **31,** (2019) 452.
[۴] Q. H. Liao, Q. Zhang, and N. R. Zhou; "*Entanglement Swapping in Two Independent Atom-Cavity-Optomechanical Systems*"; J. Korean Phys. Soc. **69,** (2016) 505.
[۵] J. Q. Liao, and F. Nori; "*Photon blockade in quadratically coupled optomechanical systems*"; Phys. Rev. A **88,** (2013) 023853.
[۶] N. E. F. Jacobs, S. W. Hoch, J. C. Sankey, A. Kashkanova, A. M. Jayich, C. Deutsch, J. Reichel, and J. G. E. Harris; "*Fiber-Cavity-Based Optomechanical Device*"; Appl. Phys. Lett. **101,** (2012) 221109.
[۷] D. F. James, and J. Jerke; "Effective Hamiltonian theory and its applications in quantum information"; Can. J. Phys. **85,** (2007) 625.
[۸] C. D. Fidio, and W. Vogel; "Entanglement signature in the mode structure of a single photon"; Phys. Rev. A **79,** (2009) 050303.
[۹] D. Y. Wang, C. H. Bai, S. Liu, S. Zhang, and H. F. Wang; "Photon blockade in a double-cavity optomechanical system with nonreciprocal coupling"; New J. Phys. **22,** (2020) 093006.
[۱۰] X. L. Feng, Z. M. Zhang, X. D. Li, S. Q. Gong, and Z. Z. Xu; "Entangling Distant Atoms by Interference of Polarized Photons"; Phys. Rev. Lett. **90,** (2003) 217902.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تولید هماهنگ مرتبه بالای گازی با استفاده از نانوشکاف پاپیونی

میرزائی پور ، فائزه؛ محبی، مسعود؛ ملک حسینی، سید محمد باقر

دانشکده علوم پایه دانشگاه ولی عصر (عج) ، رفسنجان

چکیده

در این کار ما تقویت میدان در نانوشکاف پاپیونی برای تولید هماهنگ مرتبه بالای گازی با استفاده از باریکه‌ی لیزری قوی با شدت متوسط مورد بررسی قرار می‌دهیم. نانوشکاف پاپیونی در فیلم طلا با ضخامت ۱۰ نانومتر که بر روی زیرلایه سفایر قرار گرفته است، در نظر گرفته شده است. شکاف پاپیونی با یک موج تخت قطبیده با طول موج ۸۰۰ نانومتر تحریک می شود. نتایج شبیه‌سازی نشان میدهد که با به کار بردن همزمان گاز آرگون اطراف شکاف پاپیونی تقویت میدان در گاف نانوساختار به حدی است که به تولید هماهنگ مرتبه بالا می‌توان دست یافت. با این پیشنهاد، از تخریب نانوساختار جلوگیری می‌شود و درنتیجه می‌توان از ساختار، برای دفعات زیاد جهت تولید هماهنگ مرتبه بالا استفاده کرد. همچنین یک پالس منفرد ۴۹ آتوثانیه بدون خنثی‌سازی فاز مستقیما با برهم‌نهی هماهنگ های مرتبه بالای تخت بدست می‌آید.

واژه های کلیدی: *شکاف پاپیونی، تولید هماهنگ مرتبه بالا، پلاسمون سطحی*

Gaseous high-order harmonic generation by nanobowtie aperture

Mirzaeipoor, faezeh; Mohebbi, Masoud; Malek hosseini, Seyed Mohammad bagher
Faculty of Basic Science, Vali-E-Asr University, Rafsanjan

Abstract

In this work, we investigate nanobowtie aperture field amplification to generate gaseous high-order harmonic generation by moderate intense laser beam. The nanobowtie aperture is considered in 10-nm-thick Au film deposited on a sapphire substrate. The bowtie aperture is excited with an 800-nm-wavelength polarized plane-wave. The simulation results show that by simultaneously applying argon gas around the bowtie aperture, the field strength in the nanostructure gap is such that the higher order harmonic generation can be achieved. By this offer can be prevented nanostructure from destruction, and results that one can be apply to produce harmonics for many times. Moreover, an isolated 49 as pulse without phase compensation is obtained directly by superposing the plateau high-order harmonics.
Keywords: *Bowtie aperture, High-order Harmonic Generation, Surface plasmon*

PACS-NO. 32, 81

مقدمه

یکی از برجسته ترین جلوه های غیر خطی برهمکنش یک لیزر قوی با ماده، تولید هماهنگ مرتبه بالا (HHG)[1] می‌باشد. منابع نور همدوس مبتنی بر HHG دستیابی به اطلاعات زمانی و فضایی با دقت آتوثانیه و آنگستروم را ممکن ساخته است. در نتیجه کاربردهای زیادی در شیمی، علم مواد، لیتوگرافی و ... پیدا کرده است. مکانیسم[2] تولید هماهنگ مرتبه بالا توسط مدل نیمه کلاسیکی سه مرحله‌ای قابل درک است. بر اساس این مدل در مرحله اول یک الکترون به وسیله تونل‌زنی به حالت پیوسته می‌رود در مرحله دوم الکترون آزاد شده در میدان الکتریکی نوسانی لیزر شتاب می‌گیرد تا زمانی که جهت میدان لیزری تغییر کند و به سمت یون حاصله خود باز گردد. در مرحله سوم با هسته ترکیب می شود و یک فوتون با انرژی بالا ساطع می‌کند که این انرژی برابر با مجموع انرژی جنبشی الکترون و پتانسیل یونیزاسیون می‌باشد [۱]. در سال های اخیر با توجه به موفقیت‌های کسب شده در علم پلاسمونیک به خصوص تقویت میدان الکتریکی بر پایه نانوذرات فلزی آزمایشات موفق در زمینه تولید هماهنگ مرتبه بالای گازی با استفاده از نانوساختارها انجام گرفته است [۲]. این امر از طریق افزایش میدان موضعی توسط پلاسمون‌های تشدیدی یک نانوساختار رخ می‌دهد.

در این مقاله به بررسی پاسخ نوری یک نانوساختار که متشکل از یک شکاف پاپیونی [۳] است، می‌پردازیم که تقویت قابل توجهی را در گاف[3] تشکیل شده بین دو نوک نانو مثلث ایجاد می‌کند در نتیجه می‌توان این نانو ساختار را به عنوان یک تقویت‌کننده لیزر تیتانیوم سفایر که دارای طول موج ۸۰۰ نانومتر است، پیشنهاد داده شود. به عنوان

[1] High-order Harmonic Generation

[2] سازوکار

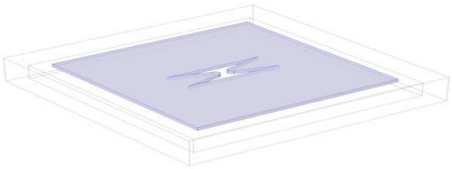
[3] فضا

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

کاربردی از این تقویت‌کننده با تزریق گاز آرگون به داخل شکاف می‌توان به تولید هماهنگ مرتبه بالا با شدت پایین لیزری و نرخ تکرار بالا موفق شد.

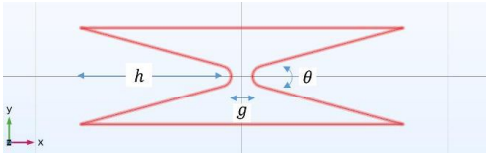
تقویت میدان لیزری

شکل۱ نمایش شماتیکی[۴] از نانوساختار شبیه‌سازی شده ارائه شده است که تحت تابش میدان فرودی قرار گرفته است. نانوساختار مورد استفاده در شبیه سازی یک شکاف پاپیونی (دو مثلث رو به روی هم با اندازه گاف مشخص) است. شکاف از جنس خلا می‌باشد که درون فیلمی از جنس طلا به ابعاد(۱۰×۴۹۰×۴۹۰)نانومتر و در نهایت بر روی زیر لایه ای از جنس سفایر به ابعاد (۵۰×۵۶۰×۵۶۰) نانومتر قرار گرفته است. کل نانوساختار در یک محفظه‌ای از جنس خلا به ابعاد (۹۰×۶۳۰×۶۳۰) نانومتر قرار گرفته است.



شکل۱ : شماتیکی از نانوساختار هوا بر روی فیلمی از طلا

این نانوساختار را تحت تابش میدان الکتریکی با طول موج ۸۰۰ نانومتر در امتداد محور Z و رو به پایین قرار می‌دهیم. قطبش میدان در راستای محور X در نظر گرفته می‌شود. با حل معادلات ماکسول می‌توان به محاسبه توزیع میدان پراکنده شده توسط نانوساختار پرداخت. تمامی شبیه‌سازی انجام شده بر مبنای روش المان محدود با استفاده از نرم‌افزار COMSOL انجام شده است.



شکل۲ : پارامترهای هندسی شکاف نانوپاپیون

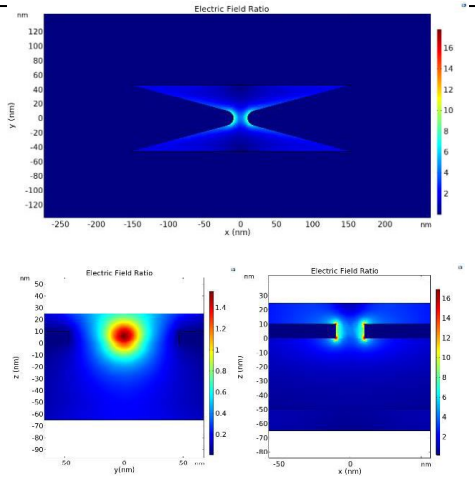
پالس اولیه، تابش خروجی یک نوسانگر فمتو ثانیه‌ی کم تقویت شده است که دقیقا بر نانوساختار متمرکز می‌شود. مطابق با شکل۲ ابعاد شکاف با استفاده از پارامترهای زاویه θ وارتفاع h و گاف d مشخص می شود. با انجام بهینه‌سازی بر مبنای بیشینه‌ی میدان پراکنده شده در فضای گاف، مقادیر این پارامترها بصورت $\theta = 30°$، h=130nm و g=20nm بدست آمد که در ادامه از آن استفاده خواهد شد. در شکل۳، توزیع میدان الکتریکی در اطراف نانوشکاف را در صفحه‌هایی که از وسط گاف عبور می کنند را نشان می‌دهند. اگر مبدا را در وسط گاف قرار دهیم بطوریکه محور x موازی با خط واصل بین دو نوک مثلث باشد و محور z عمود بر سطح تخت نانوساختار باشد، در این صورت نسبت اندازه میدان به اندازه‌ی میدان فرودی در صفحه های xy(z=5nm) ،xz(y=0) و yz(x=0) نشان داده شده است. با توجه به شکل مشاهده می‌شود که دامنه میدان مورد نظر به دامنه میدان فرودی برای نواحی معینی مثل ناحیه بین دو نوک مثلث (گاف) مثبت می‌باشد که به معنای تقویت میدان است. مقدار این تقویت نزدیک به نوک و در امتداد عمود به بزرگی حدود ۲۰ برابر می‌شود. این رفتار مشاهده شده می‌تواند با استفاده از یک شرح کیفی به وسیله‌ی مدل بر هم کنش دوقطبی-دوقطبی ساده (مطابق با شکل۴) توضیح داده شود. هنگامی که دو نانو مثلث در کنار هم به نوسان واداشته می‌شوند دارای تجمعی از بارهای محلی مثبت و منفی درون فلز و در نزدیکی سطح فلز می‌شوند (پلاسمون های سطحی جایگزیده) بطوریکه می‌توانند مانند فنر رفتار نمایند و تابش الکترومغناطیسی به اطراف، از جمله فضای گاف داشته باشند. این امر باعث تقویت میدان الکتریکی در نزدیکی نانوساختار (درون گاف) می شود.

تولید هماهنگ مرتبه بالا

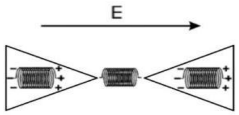
شکل۵ (بالا) مولفه ی میدان های میدان الکتریکی را بر روی خط واصل دو نوک مثلث در ارتفاع نصف ضخامت فلز را نشان می دهد. مولفه های y و z در مقایسه با مولفه ی x ناچیز هستند. پس میدان در امتداد این خط دارای قطبش خطی (در امتداد محور x) است. با توجه به اینکه مولفه‌ی x میدان الکتریکی به اندازه بیشینه و کمینه‌ی، ۳/۳ و ۱/۷ برابر میدان فرودی در محدوده‌ی گاف تقویت می‌شود پس می‌توان انتظار داشت که شدت باریکه ی فرودی به اندازه یک مرتبه تقویت شود. با استفاده از لیزر تیتانیوم سفایر با شدت باریکه $۱۰^{۱۳}$–$۱۰^{۱۱}$W/cm^2 در طول موج مرکزی ۸۰۰nm، که بر روی نانوساختار متمرکز می‌باشد، مقدار شدت میدان تقویت شده در فضای گاف از مقدار آستانه تولید

[۴] طرحواره

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

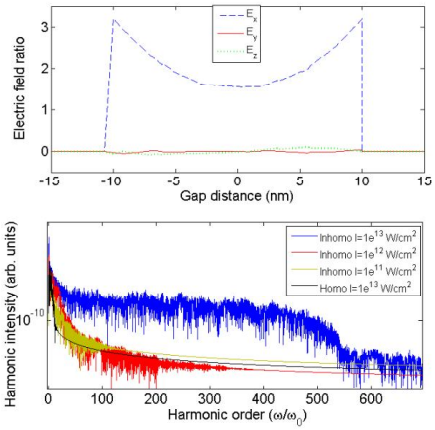


شکل۳ : توزیع میدان در صفحه‌های xy(z=5nm) (بالا)، xz(y=0) (راست) و yz(x=0) (چپ).

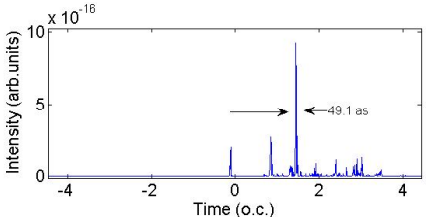


شکل۴ : یک جفت نانومثلث قرار گرفته در نزدیکی هم با قطبش میدان فرودی موازی با محور بلند جفت نانومثلث.

هماهنگ مرتبه بالا فراتر رود. پس می‌توان با پمپ گاز آرگون به داخل گاف، تولید هماهنگ مرتبه‌ی بالا داشت. به عنوان مثال با قرار دادن اتم آرگون در وسط گاف بر روی وسط خط واصل بین دو نانوساختار در ارتفاع (۵nm) از ضخامت فلزی می توان به بررسی پاسخ غیرخطی این اتم به میدان تقویت شده پرداخت. دینامیک حرکت چنین الکترونی که بر روی این خط واصله حرکت می‌کند را می‌توان با تقریب خوبی از حل معادله شرودینگر وابسته به زمان یک بعدی به دست آورد [۴]. بر این مبنا می‌توان شدت هماهنگ‌های مرتبه بالای گسیل شده را محاسبه کرد. طیف حاصله در شکل۴ نشان داده شده است. برای شدت باریکه فرودی $10^{13}W/cm^2$ در غیاب نانوشکاف مرتبه‌ی هماهنگ قطع در حدود ۱۰ می باشد. در حضور نانوشکاف مرتبه‌ی هماهنگ قطع برای شدت های باریکه فرودی $10^{13}W/cm^2$، 10^{12} و 10^{11} به‌ترتیب ۵۴۰، ۹۲ و ۱۱ خواهد بود. مطابق با شکل ۶ با برهم‌نهی هماهنگ های مرتبه ۴۰۰ تا ۵۳۰ از ناحیه تخت [۴و۵] می توان پالس آتوثانیه منفرد با پهنای ۴۹as با نسبت نویز ۰/۳ تولید کرد.



شکل۵ : مولفه‌های میدان بر روی خط واصل بین دو نوک مثلث در فضای گاف (بالا)، طیف هماهنگ برای حالت‌های در حضور نانوشکاف (شدت های فرودی متفاوت) و در غیاب نانوشکاف (خط سیاه).



شکل۶ :تولید پالس آتوثانیه با استفاده از هارمونیک های ناحیه تخت.

نتیجه‌گیری

دراین پژوهش به بررسی توزیع میدان الکتریکی و تقویت آن درون فضای گافی در نانوشکافی پاپیونی شکل در بستر طلا مستقر بر روی لایه سفایر پرداخته شد. نتایج نشان می دهد که حداکثر تقویت در نانوشکاف در حدود ۲۰برابر نسبت به میدان فرودی است. با تزریق گاز آرگون به درون شکاف و تنظیم شدت باریکه فرودی در حدود $10^{11}W/cm^2$ می‌توان موفق به تولید هماهنگ مرتبه بالا شد. برای این مورد مرتبه فرکانس قطع در حدود ۱۱ خواهد بود در حالی که در غیاب نانوشکاف هماهنگ مرتبه بالا تولید نخواهد شد. با افزایش شدت میدان فرودی به یک مرتبه و دومرتبه، مرتبه ی فرکانس قطع به ترتیب ۹۲ و ۵۴۰ خواهد بود. با معرفی این ساختار ساده می‌توان از کاواک های لیزری اضافه جهت تقویت باریکه‌ی لیزری فرودی بی‌نیاز شد. در نتیجه می‌توان یک منبع لیزری با طول موج کوتاه مناسب با نرخ تکرار در حدود مگاهرتز در اختیار داشت. لازم به ذکر است که خود لایه طلا که حاوی شکاف نانوپاپیونی است گرما را به خوبی به لایه‌ی سفایر که به عنوان بستر و پاشنده گرما عمل می‌کند. در نتیجه نانو ساختار را در برابر آسیب گرمایی در زمان تابش لیزر فمتوثانیه برای تولید هماهنگ مرتبه بالا محافظت می کند. هم چنین می‌توان با استفاده هارمونیک‌های ناحیه تخت می-

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

توان پالس آتوثانیه منفرد با پهنای ۴۹as با نسبت نویز ۰/۳ بدون خنثی‌سازی فاز تولید کرد.

مرجع ها

[1] H. Du, H, Wang, B Hu; "Isolated short Attosecond pulse generated using a two-color laser and a high-order pulse"; *Phys Rev A* **81**, (2010) 063813.

[2] S. Kim, J. Jin, Y. J. Kim, I. Y. Park, Y. Kim, S. W. J. N. Kim; "High-harmonic generation by resonant plasmon field enhancement"; *Nature* **453**, (2008) 757-760.

[3] P. Srisungsitthisunti, O. K. Ersoy, and X. Xu; "Improving near-field confinement of a bowtie aperture using surface plasmon polarizations"; *Applied Physics Letters* **98**, (2011) 223106.

[4] M. Mohebbi and S. Nazarpoor Malaei; "Electron Path Control of High-Order Harmonic Generation by a Spatially Inhomogeneous"; *Modern Optics* **63**, (2016) 643-652.

[5] N. Shahnavaz, M. Mohebbi; "The Large Near Field Enhancement due to Strong Coupling Between the LSP on the Metal Coupled Nanodisks and on the Gold Film for Short Attosecond Pulse Generation"; *Plasmonics* **16**, (2021) 305-314.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

افزایش حساسیت در حسگرهای D شکل تشدید پلاسمون سطحی: نقش ضخامت لایه‌ی پلاسمونی

رحمانفر، زهرا؛ پاکارزاده، حسن؛ شریف، وحید
دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شیراز ، بلوار مدرس ، شیراز

چکیده

حسگرهای تشدید پلاسمون سطحی در سال‌های اخیر در تشخیص پزشکی و مواد زیست-شیمیایی مورد توجه قرار گرفته‌اند. در میان این حسگرها، ساختارهای D شکل علارغم سهولت در استفاده، عملکرد بسیار بالایی را نشان داده‌اند. در اینجا یک طراحی ساده از حسگرهای تشدید پلاسمون سطحی مبتنی بر تار بلور فوتونی D شکل با بهینه‌ترین پارامترهای هندسی پیشنهاد شده است. یک لایه‌ی پلاسمونی طلا بر روی سطح صاف حسگر D شکل در نظر گرفته شده است و با انجام شبیه‌سازی‌های متعدد به کمک روش تفاضل محدود ویژه حالت (FDE)، مقادیر مختلف از ضخامت طلا برای دستیابی به بیشترین حساسیت مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد بیشترین حساسیت حسگر D شکل به میزان $۲۵۶۰۰ \frac{nm}{RIU}$ در ضخامت ۴۴ نانومتر از طلا رخ می‌دهد.

واژه های کلیدی: *تشدید پلاسمون سطحی، تار بلور فوتونی، حسگر D شکل.*

Sensitivity enhancement in D-shaped surface plasmon resonance sensors: role of plasmonic layer thickness

Rahmanfar, Zahra; Pakarzadeh, Hassan; Sharif, Vahid
Department of Physics, Shiraz University of Technology

Abstract

Surface plasmon resonance sensors have been considered in medical diagnostics and biochemical in recent years. Among these sensors, D-shaped structures have shown high performance and are simple to use. A simple design of surface plasmon resonance sensor based on D-shaped photon crystal fibers has been proposed with optimal geometric parameters. A plasmonic layer of gold has been covered on the surface of the D-shaped sensor and by performing various simulations using the finite-difference eigenmode (FDE) method, different amounts of gold thickness have been examined to achieve maximum sensitivity. The results show that the highest sensitivity of 25600 nm / RIU for the D-shaped sensor occurs when the gold thickness is set at 44 nm.

***Keywords**: surface plasmon resonance, photonic crystal fiber, D-shaped sensor*

PACS No. *42*

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مقدمه

اخیراً مطالعات گسترده ای بر روی حسگرهای تشدید پلاسمون سطحی بر مبنای تار بلور فوتونی (PCF-Based SPR) انجام شده است. این حسگرها، کاربردهای فراوانی در زمینه پزشکی، محیط زیست، صنایع غذایی، آشکارسازی و تشخیص عناصر شیمیایی دارند[۱،۲].

تشدید پلاسمون سطحی (SPR)، پدیده ای است که نوسانات جمعی الکترون‌های آزاد درآن نقش مهمی دارند و مکانی که این پدیده در آن رخ می‌دهد، سطح مشترک بین فلز و ماده‌ی دی الکتریک است؛ این پدیده اساس کار حسگرهای SPR است [۳]. از رایج‌ترین فلزات پلاسمونی مورد استفاده در این حسگرها می‌توان به طلا (Au)، نقره (Ag)، مس (Cu) و ترکیبات فلزی دیگر که دارای خواص پلاسمونی هستند مانند ایندیم نیترید (InN) و اکسید قلع ایندیم (ITO) اشاره کرد که بسیار مورد توجه قرار گرفته اند[۴،۵].

در مقایسه‌ی حسگرهای SPR مبتنی بر تار بلور فوتونی (PCF) و حسگرهای SPR مبتنی بر منشور، می‌توان گفت که در حسگرهای مبتنی بر منشور، تابش نور در زاویه‌ی خاصی انجام می‌گیرد و از این‌رو نیازمند چندین قطعه مکانیکی است و در نتیجه ساختاری حجیم و عملیاتی پیچیده به خود اختصاص می‌دهد که محدودیت‌هایی را برای سنجش از راه دور ایجاد می‌کند. در مقابل، تار بلور فوتونی، فشرده و کم وزن است که باعث کوچک بودن ساختار حسگر می‌شود[۶]. تا کنون حسگرهای SPR مبتنی بر تار بلور فوتونی متعددی گزارش شده است که می‌توان به حسگر مبتنی بر پوشش فلزی داخلی، مبتنی بر شکاف میکروسیال، مبتنی بر نانوسیم و حسگر D شکل اشاره کرد[۷]. در میان این حسگرها، معمولا حسگرهای D شکل تلفات نسبتا کمتری را تجربه می‌کنند که به عنوان یک مزیت در نظر گرفته می‌شود[۷]. حسگرهای SPR مبتنی بر تار بلور فوتونی D شکل با صیقل دادن یک قسمت از تار بلور فوتونی شکل می‌گیرند و دارای سطوح صافی هستند که لایه های فلزی پلاسمونی می‌توانند روی این سطوح صیقلی را پوشش دهند. نفوذ مد اصلی تار بلور فوتونی با قطبش در راستای y به لایه‌ی پلاسمونی می‌تواند موجب تولید مد پلاریتون سطحی (SPP) شود. با قرار دادن ماده‌ی نمونه روی سطح لایه‌ی پلاسمونی شرایط جفت شدگی بین مد اصلی و مد SPP فراهم می‌شود که اساس کار حسگر را شکل می‌دهد[۸].

اگرچه تا کنون ساختارهای متنوعی از حسگرهای D شکل گزارش شده است اما در این مطالعه، یکی از ساده‌ترین ساختارهای حسگرهای D شکل با حساسیت بسیار بالا طراحی و پیشنهاد شده است. با انجام شبیه سازی در محیط نرم افزار لومریکال، جفت شدگی مدها مورد بررسی قرار می‌گیرد و مقادیر مختلف ضخامت طلا برای دستیابی به بیشترین حساسیت حسگر امتحان می‌شود. درنهایت رنج حساسیت حسگر از ۱/۲۵ تا ۱/۴۲ با بهینه‌ترین ضخامت لایه‌ی طلا مورد بررسی قرار می‌گیرد.

طراحی و شبیه‌سازی حسگر

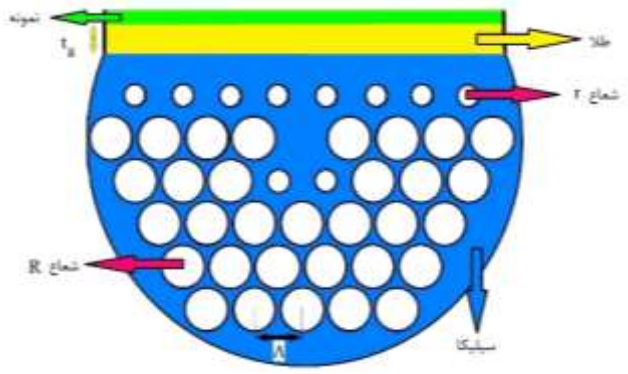
در شکل ۱، سطح مقطع حسگر پیشنهادی D شکل نشان داده شده است. شعاع حفره های هوای کوچک (r) و بزرگ (R) به ترتیب برابر ۱ و ۲ میکرومتر در نظر گرفته شده است. همچنین فاصله حفره ها از یکدیگر که با اندازه‌ی گام Λ نشان داده شده برابر ۴/۵ میکرومتر است. ماده‌ی زمینه‌ی حسگر، سیلیکا در نظر گرفته شده که ضریب شکست آن از معادله سلمیر اتخاذ شده است[۹]. لایه‌ی پلاسمونی طلا با ضخامت t_g، روی سطح صاف ساختار حسگر را پوشانده است و ماده‌ی نمونه روی لایه‌ی پلاسمونی طلا قرار گرفته است. شبیه‌سازی‌ها به کمک روش تفاضل محدود ویژه حالت (FDE) در محیط نرم افزار لومریکال انجام می‌گیرد که در آن ثابت دی الکتریک طلا با استفاده از مدل درود_ لورنتز به کمک رابطه‌ی زیر تعریف می‌شود[۱۰]:

$$\varepsilon_{Au} = \varepsilon_{\infty} - \frac{w_D^2}{w(w+j\gamma_D)} - \frac{\Delta\varepsilon\,\Omega_L^2}{(w^2-\Omega_L^2)+j\Gamma_L w} \qquad (۱)$$

که ε_{Au} ضریب گذردهی ماده‌ی دی الکتریک (طلا)، ε_{∞} ضریب گذردهی در فرکانس بالا،

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

w فرکانس زاویه ای، w_D فرکانس پلاسما، γ_D فرکانس میرایی، $\Delta\varepsilon$ ضریب وزنی، Ω_L قدرت نوسانگر، Γ_L عرض طیف می‌باشد.



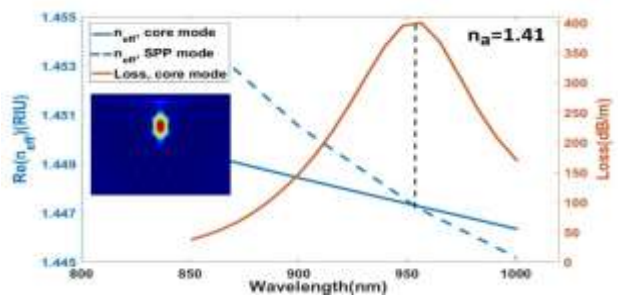
شکل ۱: سطح مقطع حسگر بلور فوتونی D شکل پیشنهادی بر مبنای تشدید پلاسمون سطحی.

نتایج شبیه‌سازی

در شکل ۲ جفت شدگی مد اصلی مغزی و مد پلاریتون سطحی (SPP) برای ماده‌ی نمونه با ضریب شکست ۱/۴۱ نشان داده شده است. ضریب شکست مؤثر (n_{eff}) مد اصلی (خط آبی) و مد SPP (خطچین آبی) با مقادیر مشخص شده روی محور افقی سمت چپ، یکدیگر را در طول موج ۹۵۵ نانومتر قطع می‌کنند. همچنین طیف افت مد اصلی با نمودار خط قرمز و مقادیر مشخص شده بر روی محور سمت راست نشان داده شده است که از رابطه‌ی زیر به دست می آید[۱۱]:

$$\alpha(\mathrm{dB/m}) = 8.686 \times \frac{2\pi}{\lambda} Im(n_{eff}) \times 10^6 \qquad (۲)$$

همانطور که مشخص است، قله افت در طول موج ۹۵۵ نانومتر برای آنالیت با ضریب شکست n_a =۱/۴۱ اتفاق می‌افتد، جایی که ضریب شکست مؤثر دو مد دقیقاً با هم برابر می‌شوند و این نشان از جفت شدگی قوی بین دو مد است. توزیع شدت مدهای اصلی و SPP درون شکل ۲ به خوبی جفت شدگی بین مدی را در طول موج قله حسگر نشان می‌دهد.



شکل ۲: نمودار ضریب شکست موثر مد اصلی (خط آبی)، مد SPP (خطچین آبی) و طیف افت مد اصلی (خط قرمز) برای ماده‌ی نمونه با ضریب شکست ۱/۴۱. شکل توزیع شدت، جفت شدگی قوی بین مدی را در طول موج تشدید ۹۵۵ نانومتر نشان می‌دهد.

با تغییر ضریب شکست ناشی از تغییر ماده‌ی نمونه، شرایط جفت شدگی فاز تغییر می‌کند و قله تشدید طیف تلفات در طول موج‌های متفاوت رخ می‌دهد. اختلاف قله‌های تشدید $\Delta\lambda_{peak}$ تقسیم بر اختلاف ضریب شکست ماده‌ی نمونه Δn_a حساسیت حسگر را نشان می‌دهد که به صورت رابطه‌ی زیر است[۱۰]:

$$S_\lambda\left[\frac{nm}{RIU}\right] = \frac{\Delta\lambda_{peak}}{\Delta n_a} \qquad (۳)$$

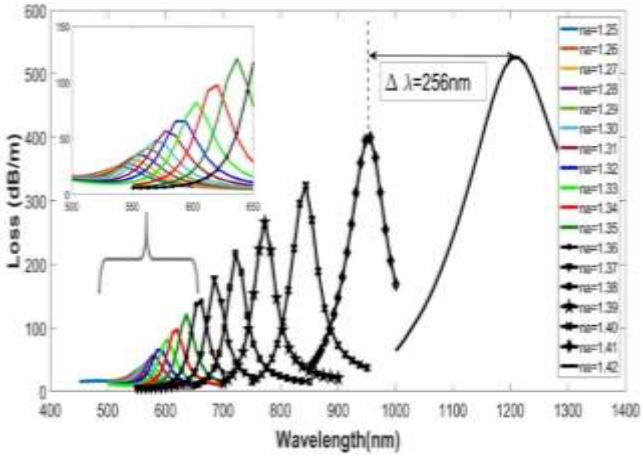
در جدول ۱، مقادیر مختلف ضخامت طلا t_g و تاثیر آن بر قله‌های تشدید (λ_{peak}) ماده‌ی نمونه‌ی $n_a = 1.41$ و $n_a =$ 1.42 و همچنین حساسیت حسگر پیشنهادی مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که قله تشدید برای ماده‌ی نمونه‌ی ۱/۴۱ در حسگر با ضخامت طلای کمتر از ۴۰ نانومتر ($t_g < 40nm$) اتفاق نمی‌افتد و از این رو حسگر کارآیی ندارد. با افزایش ضخامت لایه‌ی طلا تا ۴۴ نانومتر حساسیت حسگر به بیشینه مقدار خود یعنی $\frac{nm}{RIU}$ ۲۵۶۰۰ برای ماده‌ی نمونه‌ی $n_a = 1.41$ می‌رسد. همچنین برای مقادیر بیشتر از ۴۴ نانومتر از ضخامت لایه‌ی طلا، حساسیت حسگر همچنان بالا باقی می‌ماند و این نشان می‌دهد که خطاهای ناشی از فرآیند ساخت حسگر نمی‌تواند بر کارآیی حسگر تاثیر عمده بگذارد.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

جدول ۱: تاثیر مقادیر مختلف ضخامت طلا بر حساسیت حسگر D شکل.

$t_g\ (nm)$	$\lambda_{peak\ 1.41}\ (nm)$	$\lambda_{peak\ 1.42}\ (nm)$	$S_\lambda\ [\frac{nm}{RIU}]$
< 40	----	----	----
40	922.8	1149 nm	22620
44	955	1211 nm	25600
50	938.9	1167 nm	22810
80	955.6	1189 nm	23340

شکل ۳ محدوده‌ی حساسیت حسگر D شکل پیشنهادی را با بهینه‌ترین ضخامت از لایه‌ی پلاسمونی طلا برابر ۴۴ نانومتر نشان می‌دهد. همانطور که مشخص است حسگر پیشنهادی می‌تواند رنج وسیعی از ضریب شکست ماده‌ی نمونه از ۱/۲۵ تا ۱/۴۲ را پاسخگو باشد. همچنین قله‌های تشدید به خوبی مجزا هستند که نشان از کارآیی بالای حسگر و حساسیت بالای آن است. بیشینه اختلاف قله‌های تشدید بین ضریب شکست ۱/۴۱ و ۱/۴۲ نشان دهنده‌ی بالاترین حساسیت طول موج حسگر برابر ۲۵۶۰۰ $\frac{nm}{RIU}$ است.



شکل ۳: قله‌های تشدید از طیف افت حسگر پیشنهادی با بهینه ترین ضخامت از لایه‌ی طلا بر حسب تغییرات ضریب شکست ماده‌ی نمونه از ۱/۲۵ تا ۱/۴۲.

نتیجه گیری

در این مطالعه به کمک روش تفاضل محدود ویژه حالت (FDE)، یک حسگر D شکل بر مبنای تشدید پلاسمون سطحی با بهینه‌ترین پارامترهای هندسی طراحی و پیشنهاد شد. ضخامت لایه‌ی پلاسمونی طلا از ۴۰ نانومتر تا ۸۰ نانومتر برای دستیابی به بیشترین حساسیت مورد بررسی قرار گرفت. بیشترین حساسیت حسگر در ساختار با ضخامت ۴۴ نانومتر از لایه‌ی طلا گزارش شد. در نهایت نشان داده شد که حسگر پیشنهادی محدوده‌ی وسیعی از ضریب شکست ماده‌ی نمونه از ۱/۲۵ تا ۱/۴۲ را پاسخگو است.

مرجع ها

[1] C. Liu, F. Wang, P. K. Chu, Q. Liu, T. Sun, W. Su, and X. Lu, "Symmetrical dual D-shape photonic crystal fibers for surface plasmon resonance sensing," Optics Express, Vol. 26, Issue 7, pp. 9039-9049 **26**(7), 9039–9049 (2018).

[2] A. A. Rifat, R. Ahmed, A. K. Yetisen, H. Butt, A. Sabouri, G. A. Mahdiraji, S. H. Yun, and F. R. M. Adikan, "Photonic crystal fiber based plasmonic sensors," Sensors and Actuators B: Chemical **243**, 311–325 (2017).

[3] J. Yao, N. Luan, R. Wang, and W. Lv, "Surface plasmon resonance sensor based on D-shaped microstructured optical fiber with hollow core," Optics Express, Vol. 23, Issue 7, pp. 8576-8582 **23**(7), 8576–8582 (2015).

[4] A. A. Rifat, G. A. Mahdiraji, Y. M. Sua, R. Ahmed, Y. G. Shee, F. R. Mahamd Adikan, S. B. Lee, and J. Roh, "Highly sensitive multi-core flat fiber surface plasmon resonance refractive index sensor," Optics Express, Vol. 24, Issue 3, pp. 2485-2495 **24**(3), 2485–2495 (2016).

[5] J. N. Dash and R. Jha, "Highly Sensitive Side-Polished Birefringent PCF-Based SPR Sensor in near IR," Plasmonics 2016 11:6 **11**(6), 1505–1509 (2016).

[6] C. Liu, J. Wang, F. Wang, W. Su, L. Yang, J. Lv, G. Fu, X. Li, Q. Liu, T. Sun, and P. K. Chu, "Surface plasmon resonance (SPR) infrared sensor based on D-shape photonic crystal fibers with ITO coatings," Optics Communications **464**, 125496 (2020).

[7] A. A. Rifat, R. Ahmed, G. A. Mahdiraji, and F. R. M. Adikan, "Highly sensitive D-shaped photonic crystal fiber-based plasmonic biosensor in visible to near-IR," IEEE Sensors Journal **17**(9), 2776–2783 (2017).

[8] A. A. Rifat, G. A. Mahdiraji, R. Ahmed, D. M. Chow, Y. M. Sua, Y. G. Shee, and F. R. M. Adikan, "Copper-graphene-based photonic crystal fiber plasmonic biosensor," IEEE Photonics Journal **8**(1), (2016).

[9] H. Pakarzadeh, F. Hasanpouri, S. Hosseinabadi, and V. Sharif, "Thermally tuned parametric gain in photonic crystal fiber-based amplifiers," European Physical Journal Plus **136**(3), 1–12 (2021).

[10] H. Pakarzadeh, V. Sharif, N. Ayyanar and D. Vigneswaran, "Graphene-assisted tunable D-shaped photonic crystal fiber sensor in the visible and IR regions," JOSA B, Vol. 39, Issue 6, pp. 1490-1496 **39**(6), 1490–1496 (2022).

[11] V. Sharif and H. Pakarzadeh, "Terahertz Hollow-Core Optical Fibers for Efficient Transmission of Orbital Angular Momentum Modes," Journal of Lightwave Technology, Vol. 39, Issue 13, pp. 4462-4468 **39**(13), 4462–4468 (2021).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

اثر دما بر ابیراهی های میکروسکوپ نوری در طول موج های فرابنفش، مرئی و فروسرخ

ابری نائی، فهیمه[۱]؛ جعفری، زینب[۲]؛ دانشی، آریان[۲]

[۱] گروه فیزیک، واحد تهران مرکزی، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران

[۲] گروه فیزیک، واحد تهران شرق، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران

چکیده

در این کار برای اصلاح ابیراهیها در میکروسکوپ نوری از دوتایی بهم چسبیده بعنوان شیئی و چشمی استفاده شد. سپس ابیراهیها برای طول موجهای مرئی، فرابنفش و فروسرخ در دو دمای $-۲۰۰\ ^oC$ و $۲۰۰\ ^oC$ مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که دوتاییها در اصلاح ابیراهیها نقش موثری ایفا می کنند. کاهش دما می تواند منجر به اصلاح قابل توجهی در ابیراهیهای باقیمانده شود. نقش دما در اصلاح ابیراهیها در نواحی فروسرخ و فرابنفش محسوستر از ناحیهٔ مرئی است. چنین سیستمی در عین سادگی ثبت تصاویر واضح از موجودات ریزمقیاس متحرکی را امکانپذیر می سازد که در دماهای بالاتر بدلیل تحرک زیاد، تفکیک پذیری آنها براحتی ممکن نیست.

واژه های کلیدی: *ابیراهیها، دما، دوتایی بهم چسبیده، میکروسکوپ نوری، نرم افزار زیمکس.*

Effect of Temperature on the Aberrations of Optical Microscope at Ultraviolet, Visible, and Infrared Wavelengths

Abrinaei, Fahimeh[۱]; Jafari, Zeynab[۲]; Daneshi, Arian[۲]

[۱] *Department of Physics, Central Tehran Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran*

[۲] *Department of Physics, East Tehran Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran*

Abstract

In this work, cemented doublet was used as objective and eyepiece to correct the aberrations in optical microscope. The aberrations were then examined for visible, ultraviolet and infrared wavelengths at -۲۰۰ and ۲۰۰ ^oC. The results showed that cemented doublet plays an effective role in the correction of aberrations. A decrease in temperature can lead to a significant correction in the remaining aberrations. The role of temperature in the correction of aberrations in the infrared and ultraviolet regions is more noticeable than visible regions. Such a simple system makes it possible to record clear images of moving microscale organisms, which the resolution is not easily possible at higher temperatures due to their high mobility.

***Keywords**: Aberrations, Cemented Doublet, Optical Microscope, Temperature, Zemax Software.*

PACS No. ۴۲

مقدمه

ابیراهی نوعی اختلال در فرآیند شکست پرتو نور حین عبور از قطعات اپتیکی با ضرایب شکست مختلف است که منجر به انحراف مسیر پرتو از مسیر تعیین شده توسط فرمول گاوس و عدم تیزی یکنواخت در تصاویر حاصله می گردد. به طور کلی ابیراهیها موجب کاهش دقت تصاویر می شوند پس همواره سعی بر آن است تا با اعمال شرایط ایده آل و یا طراحی سیستمهای

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

اپتیکی بهینه از میزان ابیراهی کاسته شود [۱]. از آنجا که عدسیهای اپتیکی از جنسهای مختلف ساخته می شوند پرتو نور به دلیل تغییر محیط از مسیر مستقیم خارج و تحت یک زاویهٔ خاص منحرف می شود. در یک سیستم اپتیکی پرتوها عموما از روی نقاط مختلفی از جسم منتشر می شوند. به دلیل عیوب انکساری که ناشی از تاثیر ضریب شکست و نیز انحنای عدسی است، فرود پرتو در نقطه ای خارج از محدودهٔ ایده آل رخ می دهد که منجر به بروز ابیراهیها و کاهش دقت و تیزی در تصاویر می گردد [۲].

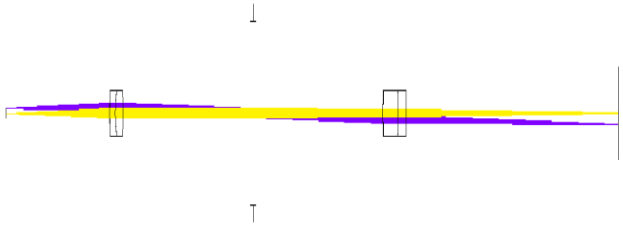
یکی از ابزارهای نوری میکروسکوپ است که در ساده ترین صورت از دو عدسی شیئی (با فاصلهٔ کانونی کم) و چشمی (با فاصلهٔ کانونی بیش از شیئی) تشکیل شده است. یکی از راههای موثر در رفع ابیراهیها استفاده از عدسیهای دوتایی است. با توجه به اینکه یک عدسی دوتایی، ترکیبی از دو عدسی با فاصله های کانونی متفاوت است در صورت ترکیب دو عدسی، فاصلهٔ کانونی نهایی برای پرتو عبوری، برآیندی از فاصلهٔ کانونی تک تک عدسیها خواهد بود. ضمن اینکه در دوتاییها هر سطح در جهت اصلاح ابیراهی ایجادشده توسط سطح قبلی عمل خواهد کرد [۳].

با توجه به اینکه تصاویر حاصل از سیستمهای اپتیکی مجموعه ای از پیکسلها است که در کنار یکدیگر قرارگرفته اند، افزایش بزرگنمایی (زوم تصویر) اغلب با کاهش کیفیت تصویر همراه خواهد بود. در ابعاد مورد بررسی در مطالعات میکروسکوپیک این امر موجب عدم تفکیک کامل ذرات از یکدیگر خواهد شد چرا که گاها بخشی از ذرات در پشت یکدیگر قرار گرفته و مرز میان آنها به صورت واضح مشخص نیست. در چنین شرایطی ردیابی تک تک ذرات به سختی امکانپذیر خواهد بود [٤]. از سوی دیگر، در برخی مطالعات سرعت حرکت بعضی از ذرات و الگوهای رفتاری آنها ممکن است به گونه ای باشد که فرصت کافی برای بررسیهای لازم روی رفتار و برهم کنش ذرات در دمای محیط وجود نداشته باشد؛ لذا مناسبتر است مطالعات در سرعتهای کمتر، تحت دمای پایینتر صورت پذیرد. این در حالی است که برخی از موجودات زندهٔ میکروسکوپیک به دما حساس هستند و در بازه های دمایی خاصی امکان حیات ندارد. موارد ذکر شده مجموعه دلایلی است که لزوم تصویربرداری در دماهای مختلف را آشکار می سازد. از آن جا که همواره تصویربرداری با نقص تصاویر ناشی از ابیراهیها همراه خواهد بود، بررسی نقش دما در میزان ابیراهیها یک ضرورت است [٥].

در این مقاله پس از شبیه سازی یک میکروسکوپ نوری واقعی ساده در زیمکس، میزان ابیراهیها در طول موجهای مرئی، فرابنفش و فروسرخ محاسبه شد. سپس اثر دما بر ابیراهی میکروسکوپ نوری در دو دمای ^{o}C ۲۰۰- و ^{o}C ۲۰۰ بررسی و نتایج گزارش شد.

روش طراحی میکروسکوپ نوری

در این مطالعه، ابتدا ساختار داخلی یک میکروسکوپ نوری واقعی ساده در محیط نرم افزار زیمکس شبیه سازی شد. شکل ۱ نمایی شماتیک از میکروسکوپ نوری مورد بررسی را نشان می دهد.



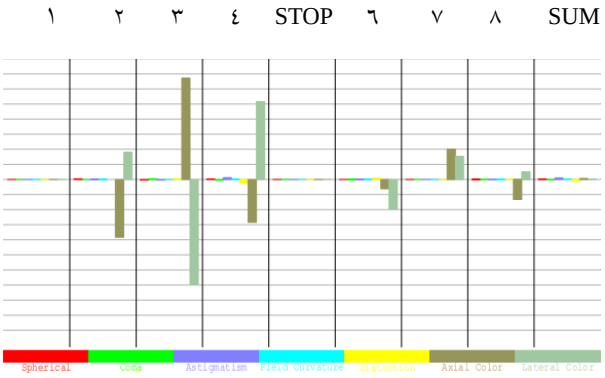
شکل ۱: چیدمان المان های اپتیکی در شبیه سازی میکروسکوپ نوری.

فاصلهٔ کانونی عدسی دوتایی اول برابر ۲۱/۱٤۰٥ mm و فاصلهٔ کانونی عدسی دوتایی دوم برابر ٤۳/٥۱٥۸ mm انتخاب شد. جنس لنزها به ترتیب N-SF۱۰، N-BAF۱۰، N-BK۷ و N-SF٥ و طول جسم ۰/٥ mm درنظر گرفته شد. طول موج خطوط F، d، C (بترتیب۰/٤۸٦۱۳۲۷ µm، ۰/٥۸۷٥٦۱۸ µm، و ۰/٦٥٦۲۷۲٥ µm) برای ناحیه مرئی، طول موج ۱/۰٦٤ µm برای ناحیه فروسرخ و طول موج ۰/۳۷۹٦۲ µm برای ناحیهٔ فرابنفش لحاظ شده است. در نهایت با اعمال دماهای ^{o}C ۲۰۰- و ^{o}C ۲۰۰ بر ساختار میکروسکوپ نوری تحت بررسی، اصلاحات ابیراهیها مورد بحث و بررسی قرار گرفت.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

نتایج و بحث

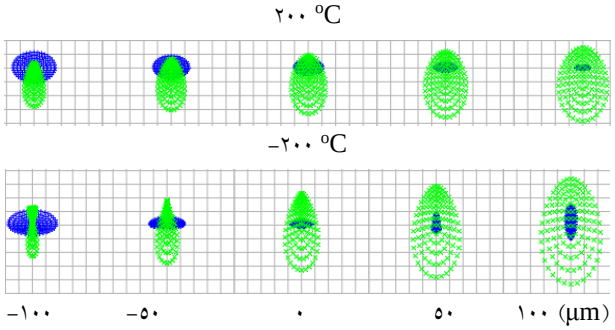
هیچ سیستم اپتیکی وجود ندارد و نمی تواند چنان طراحی شود که به طور همزمان فاقد همهٔ انواع ابیراهیها باشد؛ لذا در بررسی سیستمهای اپتیکی در جهت رفع آن دسته از ابیراهیهایی اقدام می شود که بیشترین تاثیر را روی نقصهای تصویر داشته باشند [۱، ٦]. این امر لزوم بررسی میزانِ تاثیر انواع مختلف ابیراهی روی میکروسکوپ طراحی شده را آشکار می کند. شکل ۲ نتایج تاثیر ابیراهیهای مختلف را در شکست از سطوح دوتاییهای شیئی و چشمی میکروسکوپ نشان می دهد. برای انجام مقایسهٔ راحتتر، ابیراهیهای کما، آستیگماتیسم، واپیچش، کروی، رنگی و انحنای میدان با رنگ های مختلف در ردیف انتهایی شکل ۲ نشان داده شده اند. می دانیم هر یک از سطوح مختلف در دوتایی ها قابلیت اصلاح ابیراهی ایجاد شده توسط دیگر سطوح را داراست، بگونه ای که مزیت استفاده از دوتایی ها نیز در همین نکته است. ستون انتهایی شکل ۲ برآیند ابیراهیها در شکست پرتوها از کلیهٔ سطوح را نشان می دهد. از نتایج این ستون استنباط می شود که استفاده از دوتاییها منجر به اصلاح قابل توجهی در ابیراهی شده است. بگونه ای که ابیراهی باقیمانده در ستون آخر نسبت به ستونهای قبلی کاهش قابل توجهی داشته است. در مقیاسهای عادی شاید این مقدار از ابیراهی باقیمانده تاثیر چندانی در کیفیت تصاویر ایجاد نکند ولی در ریزمقیاس ضرورت اصلاح همین حد از ابیراهی نیز احساس می شود.



شکل ۲: میزان ابیراهیها در شکست از سطوح مختلف دوتاییهای شیئی و چشمی میکروسکوپ؛ ستون آخر برآیند ابیراهیها را نشان می دهد. فاصلهٔ بین خطوط افقی نمودار ۰/۰۰۰۲۰ mm است.

بر طبق نتایج حاصل از شکل ۲ برای میکروسکوپ طراحی شده در این کار، ابیراهی های رنگی و واپیچش روی بهینه سازی تصویر در میکروسکوپ بیشترین تاثیر را دارند. لذا بررسی اثر دما با تمرکز روی ابیراهیهای رنگی و واپیچش و با صرف نظر از اثرات ابیراهیهای کروی، کما، آستیگماتیسم و انحنای میدان انجام شد.

شکل ۳ اثر دما روی نحوهٔ کانونی شدن پرتوهای خروجی از بالاترین نقطهٔ جسم در طول موجهای نواحی فروسرخ و فرابنفش را نشان می دهد. مشاهده می شود که تغییرات دما در نواحی فروسرخ و فرابنفش اثر محسوسی روی محل کانونی شدن پرتوها ایجاد می کند. چنانچه در شکل ۳ مشاهده می شود، در دمای ^{o}C ۲۰۰ پرتوهای فروسرخ روی مرکز و پرتوهای فرابنفش حدود µm ۱۰۰ پس از مرکز کانونی شده است. این در حالی است که در دمای ^{o}C ۲۰۰- ، کانونی شدن فروسرخ µm ۱۰۰ قبل از مرکز و کانونی شدن فرابنفش در مرکز رخ می دهد. پس اثر دما در این نواحی قادر است تا میزان µm ۱۰۰ محل کانونی شدن پرتوها را جابجا کند. همگرایی کمتر پرتوهای فرابنفش نسبت به فروسرخ که در شکل ۳ مشاهده می شود ناشی از تاثیرات پراکندگی است.

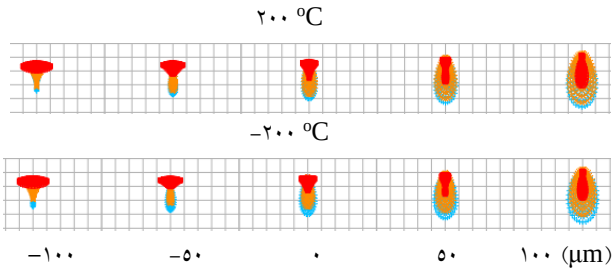


شکل ۳: نمودار لکهٔ پرتوهای ناحیهٔ فرابنفش (آبی رنگ) و فروسرخ (سبزرنگ) در دماهای ^{o}C ۲۰۰ و ^{o}C ۲۰۰-. هر واحد عمودی در نمودار برابر µm ۲ است.

وضعیتی مشابه شکل ۳، برای طول موج های ناحیهٔ مرئی در شکل ٤ نمایش داده شده است. مشاهده می شود که در شکل ٤ طول موج آبی در فاصله µm ۱۰۰ قبل از مرکز، طول موج نارنجی

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

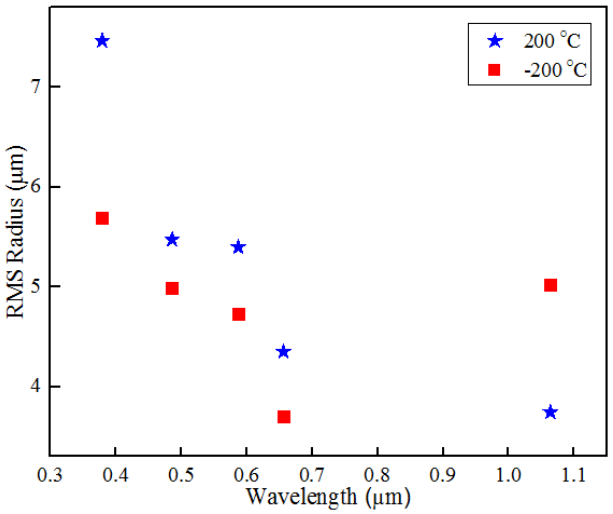
روی مرکز و طول موج قرمز در فاصله ای بین ۵۰ µm تا ۱۰۰ µm بعد از مرکز کانونی می شوند.



شکل ٤: نمودار لکهٔ پرتو های ناحیهٔ مرئی در دماهای ۲۰۰ °C و ۲۰۰- °C . هر واحد عمودی در نمودار برابر ۲ µm است.

نتایج بررسی در ناحیهٔ مرئی نشان می دهد که در این ناحیه تغییرات دما تفاوت ملموسی را در نحوهٔ همگرایی پرتوهای مرتبط با هر طول موج ایجاد نمی کند، پس در مقایسه با نواحی فرابنفش و فروسرخ میزان تغییر ابیراهیها با دما در این ناحیه قابل چشم پوشی است.

اثر تغییرات دما روی اندازهٔ لکهٔ ناشی از پرتوهای خروجی از بالاترین نقطهٔ جسم در طول موجهای نواحی فروسرخ و فرابنفش در شکل ۵ نشان داده شده است. به این منظور مقادیر جذر میانگین مربعات[۱] اندازهٔ شعاع لکه روی مرکز بر حسب طول موجهای نواحی مرئی، فرابنفش و فروسرخ در دماهای ۲۰۰ °C و ۲۰۰- °C رسم شده است. مشاهدهٔ تغییرات شعاع لکه در طول موجهای مختلف مؤید این نکته است که اثر تغییرات دما در ناحیهٔ مرئی کمتر از نواحی طول موجی فرابنفش و فروسرخ است.



شکل ۵: نمودار تغییرات جذر میانگین مربعات اندازهٔ شعاع لکهٔ بر حسب طول موجهای نواحی مرئی، فرابنفش و فروسرخ در دماهای ۲۰۰ °C و ۲۰۰- °C .

نتیجه گیری

نتایج این پژوهش نشان می دهد دوتاییهای شیئی و چشمی در میکروسکوپ طراحی شده قادرند ابیراهیها را به میزان زیادی اصلاح کنند. تغییرات دما می تواند اثر ابیراهیهای باقیمانده را کاهش دهد. اثر دما در اصلاح ابیراهیها در نواحی فروسرخ و فرابنفش محسوستر از ناحیهٔ مرئی است. اگرچه این تغییر از مرتبهٔ 10^{-6} m است ولی در مطالعات ریزمقیاس همین مقادیر نیز دارای اهمیت است. نتایج این تحقیق می تواند در اصلاح ابیراهیهای موجود در مطالعات ریزمقیاس و به طور خاص سیستمهایی که در دمای پایین کار می کنند، مفید باشد.

مرجع‌ها

[۱] F. Jenkins, H. White, *Fundamentals of optics*, p. ۱۸۰, McGram-Hill Education Press, ۲۰۰۱.
[۲] H. Eugene, *Optics*, Addison-Wesley Press, ۲۰۰۲.
[۳] W.J. Smith, *Modern Optical Engineering*, McGram-Hill Education Press, ۲۰۰۷.
[٤] A.D. Kashkanova, A.B. Shkarin, R.G. Mahmoodabadi, M. Blessing, Y. Tuna, A.Gemeinhardt, V. Sandoghdar, "Precision single-particle localization using radial variance transform", *Opt. Express* ۲۹, No. ۷ (۲۰۲۱) ۱۱۰۷۰-۱۱۰۸۳.
[٥] F. Reitmayer, H. Schroeder, "Effect of temperature gradiants on the wave aberration in a thermal optical glasses", *Appl. Opt.* ١٤, No.٣ (١٩٧٥) ٧١٦-٧٢٠.
[٦] J. M. Geary, *Introduction to lens design: with practical ZEMAX examples*, Willmann-Bell, Inc., ۲۰۰۲.

[۱] Root Mean Square (RMS)

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی عملکرد تشدیدگر تخت- محدب برای یک لیزر CTH:YAG با دمش لامپی

آرزو جلیل زاده حیدرلو[۱]؛ داوود رزاقی[۲]؛مرضیه اکبری[۲]؛ مهدی شایگان منش[۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه علم و صنعت ایران، نارمک، تهران

[۲] پژوهشکده فتونیک و فناوری‌های کوانتومی، پژوهشکده علوم و فنون هسته‌ای، امیرآباد شمالی، تهران

چکیده

در این مقاله طراحی یک تشدید گر به منظور افزایش حجم مُد اصلی (TEM_{00}) یک لیزر CTH:YAG با طول موج ۲۰۸۰ nm مورد بررسی قرار گرفته است.به این منظور تشدیدگر تخت- محدب مبنای طراحی قرار داده شده است و طراحی به کمک روش ماتریس ABCD به گونه‌ای انجام شده است که حساسیت حجم مدی به تغییرات فاصله کانونی عدسی گرمایی میله لیزر حداقل باشد. حجم مدی برای شعاع‌های مختلف آینه محدب و فواصل مختلف میله از آینه تخت محاسبه شده و با نتایج مربوط به تشدیدگر تخت-تخت متقارن مقایسه شده است. نتایج نشان می دهند که در $g_1^* g_2^* = 1/2$، اندازه لکه لیزر نسبت به تغییرات فاصله کانونی عدسی گرمایی میله کمترین حساسیت را خواهد داشت.

واژه های کلیدی: *لیزر CTH:YAG، تشدیدگر تخت- محدب، عدسی گرمایی میله لیزر، ماتریس ABCD*

Evaluation of plane-convex resonator performance for a flashlamp pumped CTH:YAG laser

Jalilzadeh Heydarlou, Arezou[1]; Razzaghi, Davood[2]; Akbari, Marziyeh[2]; Shayganmanesh, Mahdi[1];

[1] Department of Physics, University of Science and Technology, Narmak, Tehran
[2] Photonics and Quantum Technologies Research School, NSTRI, North Amirabad, Tehran

Abstract

In this paper, the design of a resonator in order to increase the fundamental mode volume (TEM_{00}) of a CTH:YAG laser with a wavelength of 2080 nm is investigated. For this purpose, a plano-convex resonator is designed. The design is performed using the ABCD matrix method in such a way that the sensitivity of the mode volume is minimum to the focal length of the laser rod. The mode volumes for different radii of convex mirrors and different distances of the rod from the plane mirror are compared with the results for symmetric plane-parallel resonator. The results show that for $g_1^* g_2^* = 1/2$, the laser spot size will have the minimum sensitivity to the changes of the rod focal length.

***Keywords**: CTH:YAG laser, Plano-convex resonator, laser rod thermal lens, ABCD matrix.*

PACS No. 42

مقدمه

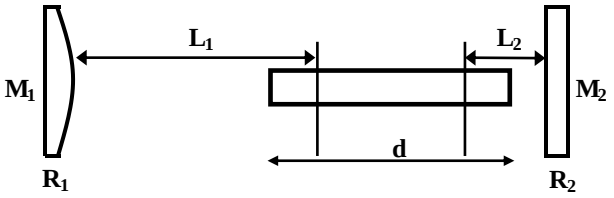
امروزه، لیزرهای حالت جامد دارای کاربردهای فراوان در زمینه‌های مختلف صنعت، پزشکی، سنجش از راه دور دارند [۱]. همچنین، ماده‌های فعال لیزری بر پایه YAG به دلیل خواص بی‌نظیر مکانیکی و حرارتی مورد توجه بسیاری از محققین در این زمینه می‌باشند. از جمله‌ی آنها می‌توان به بلور CTH:YAG با طول موج لیزری ۲۰۸۰ nm، اشاره کرد که به دلیل جذب زیاد در آب، دارای کاربردهای گسترده در پزشکی و سنجش از راه دور می‌باشد. برای استخراج بیشتر انرژی و کاهش واگرایی پرتوی لیزر در مُد اصلی (TEM_{00}) نیاز است که اندازه لکه‌ی مُد اصلی افزایش یابد.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

در دهه‌های اخیر، تحقیقات زیادی در این زمینه به خصوص در شاخه یک میکرون انجام شده است. در این مقاله، در راستای توسعه لیزرهای شاخه دو میکرون با دمش لامپی، طراحی تشدیدگر به منظور افزایش حجم مُدی در این شاخه (لیزر CTH:YAG) مد نظر است. در حقیقت، اتلاف گرمایی زیاد در بلور (هنگام دمش لامپی) باعث ایجاد یک گرادیان حرارتی و در نتیجه تغییرات فضایی ضریب شکست در میله لیزر می‌شود. این باعث می‌شود که میله لیزر همانند یک عدسی عمل کرده و ساختار مُد را تغییر دهد. فاصله کانونی این عدسی با تغییر توان دمش تغییر می‌کند و می‌تواند عملکرد لیزر را تحت تاثیر قرار دهد. طراحی تشدیدگر لیزر به روش ماتریس ABCD یکی از روش‌های پرکاربرد در بررسی انتشار پرتوی لیزر در تقریب پیرامحوری است که در آن ویژگی‌های اپتیکی به صورت عناصر ماتریس در نظر گرفته می‌شوند [۲]. یکی از مهم‌ترین مشخصه‌های یک تشدیدگر پایداری آن است که با پارامترهای تشدیدگر معادل g_1^* و g_2^* نشان داده می‌شود. پایداری به این معنی است که صرف نظر از اتلاف توان، توزیع میدان نوری داخل تشدیدگر بعد از هر رفت و برگشت خود را بازتولید کند $(0 < g_1^* g_2^* < 1)$ [۱]. ترکیب‌های مختلف تشدیدگرهای پایدار برای تامین انرژی و کیفیت پرتوی بالا و واگرایی کم ساخته شده‌اند. در حالیکه از لیزرهای چندمُد و ناپایدار، توان‌هایی از مرتبهٔ کیلووات قابل حصول است، توان خروجی لیزرهای پایدار مُد اصلی (TEM_{00}) به چند ده وات محدود می‌شود و این به دلیل هم‌پوشانی کم مُد اصلی با مادهٔ فعال لیزری است. بنابراین، برای افزایش توان خروجی، نیاز به افزایش اندازه لکهٔ مُد اصلی در داخل میله لیزر است.

تئوری تشدیدگر تخت- محدب

برای بهره‌برداری کارآمد از یک لیزر حالت جامد نیاز است که طراحی با هدف مرتفع کردن دو مشکل اساسی انجام گردد [۳]: ۱) حجم مُد اصلی در داخل میله لیزر باید بیشینه باشد تا توان خروجی و بازدهی بالا امکان‌پذیر باشد. ۲) تشدیدگر نباید نسبت به فاصله کانونی و اختلالات عدسی گرمایی حساس باشد تا از ناپایداری توان خروجی جلوگیری گردد. برای جبران عدسی حرارتی استفاده از آینه محدب با شعاع کوچک و یا قرار دادن عدسی‌های منفی در انتهای میله پیشنهاد شده است [۱]. می‌توان نشان داد که با استفاده از یک آینه محدب، شرط $g_1^*/g_2^* > 1$ که اندازه لکه بزرگ بر آینه ۲ را تضمین می‌کند، برقرار خواهد شد. همچنین به صورت مستقل می‌توان شرط $g_1^* g_2^* = 1/2$ را که در آن حساسیت تشدیدگر به تغییرات فاصله کانونی عدسی گرمایی میله حداقل می‌شود، برقرار ساخت [۱و۳]. یکی از تشدیدگرهای رایج در لیزرهای حالت جامد با قدرت متوسط و بالا تشدیدگر مقعر- محدب است که دارای یک آینه محدب با شعاع کوچک و یک آینه معقر با شعاع بزرگ می‌باشد. در این تشدیدگر واگرایی آینه محدب، ضمن برقراری دو شرط فوق‌الذکر، می‌تواند عدسی حرارتی را جبران کند. در این مقاله، برای سادگی تنظیمات از یک آینه تخت به جای آینه مقعر (با شعاع بزرگ) استفاده شده است. طرحواره‌ای از این نوع تشدیدگر در شکل ۱ نشان داده شده است. به منظور دستیابی به اندازه لکه بزرگ و در نهایت بیشینه حجم مُدی، باید فاصله‌ی میله لیزر تا آینه تخت حداقل باشد [۱].



شکل ۱ : طرحواره‌ای از یک تشدیدگر تخت- محدب. در این شکل فاصله آینه‌های ۱ و ۲ به ترتیب L_1 و L_2 از صفحات اصلی میله در نظر گرفته شده‌اند.

به منظور طراحی تشدیدگر با بیشینه حجم مُدی با استفاده از نرم‌افزار MATLAB، میله لیزر به صورت یک عدسی ضخیم به صورت ماتریسی مدل شده است (رابطه ۱) [٤].

$$\begin{bmatrix} \cos(\gamma d) & \sin(\gamma d)/n_R\gamma \\ n_R\gamma \sin(\gamma d) & \cos(\gamma d) \end{bmatrix} \quad (۱)$$

که در آن d، طول میله‌ی لیزر و $n = n_0 - \frac{n_2 r^2}{2}$ ،$\gamma^2 = \frac{n_2}{n_0}$ و r فاصله از محور نوری است. همچنین، توان شکستی میله لیزر را می‌توان از رابطه $D_f = \frac{1}{f} = n_0 \gamma \sin\gamma d$ به دست آورد. در محاسبات مشخصات بلور CTH:YAG با طول ۱۲۰ *mm*، شعاع ۲/۵ *mm* و ضریب شکست ۱/۸۳ در محاسبات وارد شده است. با محاسبه عناصر ماتریس معادل یک رفت و برگشت در تشدیدگر، می‌توان شعاع پرتو را در هر نقطه مرجع دلخواه (که ماتریس رفت

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

و برگشت نسبت به آن نوشته شده)، به صورت رابطه (۲) نوشت [۲]:

$$w = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/2} \frac{|B|^{1/2}}{\left[1-\left(\frac{D+A}{2}\right)^2\right]^{1/4}} \quad (۲)$$

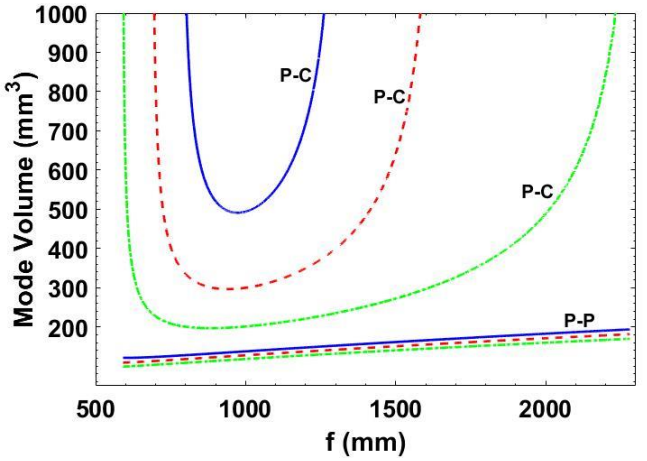
که در آن λ طول موج لیزر و A، B و D عناصر ماتریس رفت و برگشت نسبت به نقطه مرجع دلخواه هستند. در این صورت حجم مُدی را می‌توان با استفاده از رابطه ۳ به دست آورد:

$$V_{00} = \iint e^{\frac{-2r^2}{w^2}} (2\pi r dr dz) \quad (۳)$$

نتایج

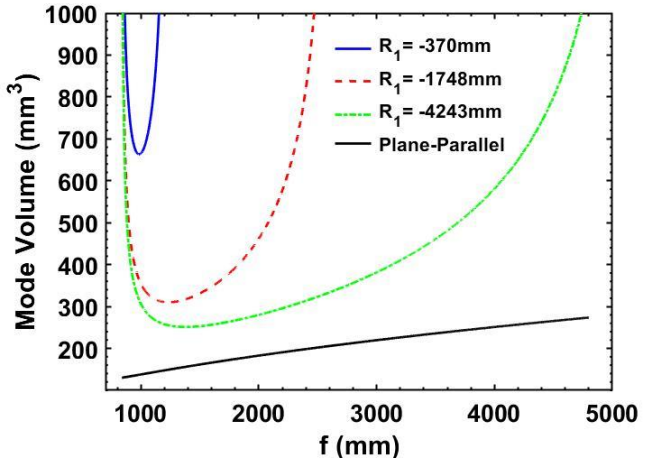
همان طور که ذکر شد، عملکرد لیزر وابسته به تغییرات فاصله کانونی عدسی گرمایی میله لیزر است و این تغییرات حتی ممکن است منجر به خاموش شدن لیزر شوند. بنابراین نیاز است که هنگام شبیه‌سازی از مقادیر واقعی و عملی فاصله کانونی استفاده شود. فاصله کانونی عدسی گرمایی بلور CTH:YAG به صورت تجربی به روش پرتوی گمانه اندازه گیری شده است [۵]. در این مقاله از نتایج این اندازه‌گیری (با مقدار متوسط $f = ۱۳۰۰\ mm$ در انرژی الکتریکی ورودی J ۲۴۰) استفاده شده و شعاعی که به ازای آن شرط $g_1^* g_2^* = 1/2$ برآورده می‌شود، محاسبه شده است.

شکل ۲ حجم مدی بر حسب فاصله کانونی عدسی گرمایی میله را برای طول‌های مختلف تشدیدگر نشان می‌دهد. در این شکل حجم مدی برای تشدیدگرهای متقارن تخت-تخت با طول معادل نیز نشان داده شده است. همانطور که در این شکل مشاهده می‌شود، با افزایش طول تشدیدگر، حجم مدی در هر دو نوع تشدیدگر کاهش می‌یابد. اما به طور مثال، تشدیدگر تخت-محدب با طول ۸۰۰ mm دارای حجم مدی بیشتری نسبت به تشدیدگر تخت-تخت متقارن با طول ۱۰۰۰ mm می‌باشد که نشان دهنده این است که با انتخاب یک تشدیدگر تخت- محدب می‌توان به تشدیدگری با طول کوتاهتر و حجم مدی بیشتر دست یافت.



شکل ۲. حجم مدی بر حسب فاصله کانونی عدسی گرمایی میله برای طول های مختلف تشدیدگرهای تخت- محدب (P-C) و متقارن تخت-تخت (P-P). در این شکل رنگ آبی نشان دهنده $L = ۱۰۰۰\ mm$، رنگ قرمز خط چین نشان دهنده $L = ۹۰۰\ mm$ و رنگ سبز نقطه خط چین نشان دهنده $L = ۸۰۰\ mm$ است.

شکل‌های ۳ و ٤ حجم مدی بر حسب فاصله کانونی عدسی گرمایی میله را برای شعاع های مختلف آینه محدب به ترتیب برای فاصله‌ی میله از آینه ۲ ($L_2 = ۱۰۰\ mm$ و $L_2 = ۱۵۰\ mm$) نشان می دهند. برای مقایسه، حجم مُدی یک تشدیدگر تخت-تخت متقارن با همان طول نیز در این شکل‌ها نمایش داده شده است.

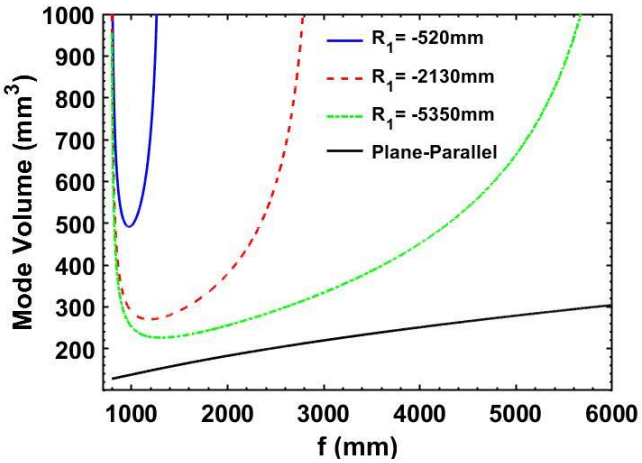


شکل ۳: حجم مدی بر حسب فاصله کانونی میله برای شعاع‌های مختلف از آینه محدب ($L_2 = ۱۰۰\ mm$).

همانطور که شکل‌های ۳ و ٤ نشان می‌دهند، حجم مدی در همه حالت‌های نشان داده شده از حجم مدی تشدیدگر تخت-تخت متقارن بیشتر است. همچنین با کاهش شعاع انحنای آینه‌ی محدب، حجم مدی افزایش می‌یابد. البته این افزایش با کاهش ناحیه‌ی پایدار همراه بوده است. در حقیقت، در شعاع‌های کوچکتر، میله با

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

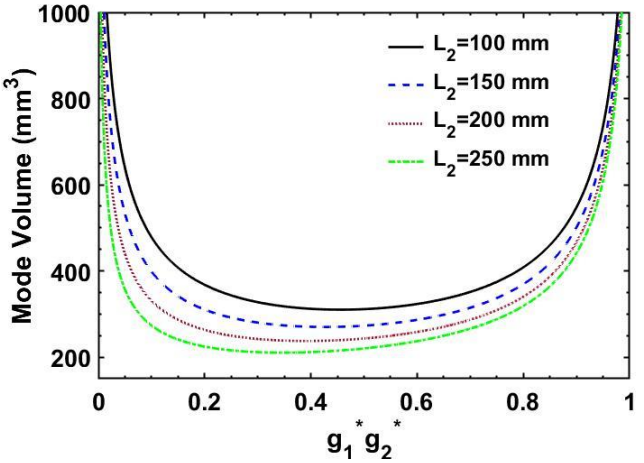
فاصله کانونی بزرگتر (زمان‌های اولیه دمش میله یا انرژی الکتریکی ورودی کم) تشدیدگر را ناپایدار می‌سازد و عملا فرایند لیزر انجام نخواهد شد. این خود باعث ایجاد زمان تاخیری بین پالس دمش و پالس لیزر خواهد شد. با توجه به شکل‌های ۳ و ٤، این زمان تاخیر برای شعاع‌های کوچکتر آینه محدب بیشتر خواهد بود.



شکل ٤ : حجم مدی بر حسب فاصله کانونی میله برای شعاع‌های مختلف از آینه محدب ($L_2 = ۱۵۰\ mm$).

همچنین با مقایسه شکل‌های ۳ و ٤ می توان دریافت که با کاهش فاصله‌ی میله و آینه ۲، حجم مدی افزایش خواهد یافت. بنابراین، طبق فرض اولیه، سعی خواهد شد که فاصله میله تا آینه ۲ حداقل باشد. البته این فاصله به دلیل موانع عملیاتی نمی‌تواند صفر شود.

شکل ۵ نمودار حجم مدی بر حسب $g_1^* g_2^*$ را به ازای فاصله‌های مختلف میله از آینه ۲ نشان می‌دهد. در این شکل هم مشاهده می‌شود که با کاهش فاصله‌ی میله از آینه تخت، حجم مدی افزایش یافته است.



شکل ۵: نمودار حجم مدی بر حسب $g_1^* g_2^*$ برای فاصله‌های مختلف میله از آینه محدب.

همچنین، از آنجا که حجم مدی معیاری از اندازه لکه لیزر بر روی میله است، شکل ۵ نشان می‌دهد که در $g_1^* g_2^* = 1/2$، تغییرات اندازه لکه نسبت به $g_1^* g_2^*$ کمینه است. این امر نشان‌دهنده کمترین حساسیت نسبت به تغییرات فاصله کانونی عدسی گرمایی میله می‌باشد، زیرا تغییرات $g_1^* g_2^*$ در یک تشدیدگر (با مشخصات تعیین شده) تابع تغییرات فاصله کانونی است.

نتیجه گیری

در این مقاله، یک تشدیدگر تخت- محدب به منظور افزایش حجم مدی و کاهش حساسیت به فاصله کانونی عدسی گرمایی میله طراحی شد. به این منظور از روش ماتریس رفت و برگشت ABCD استفاده شد. نتایج شبیه سازی نشان می دهند که این تشدیدگر نسبت به تشدیدگر تخت-تخت متقارن دارای حجم مدی بالاتری است. همچنین، نتایج نشان می دهند که با کاهش شعاع آینه محدب می توان به مقادیر حجم مدی بیشتری دست یافت. اما این امر با کاهش ناحیه پایداری که در آن می توان لیزر گرفت همراه خواهد بود. همچنین، برای دستیابی به بیشینه حجم مدی لازم است که تا حد امکان میله لیزر به آینه تخت نزدیک شود.

مرجع ها

[۱] W. Koechner; *"Solid-State Laser Engineering"*; 6th edition, Springer, (2005) 231-241.
[۲] J. T. Verdeyen; *"Laser Electronics"*; 3nd edition, Prentice Hall, (1989) 35-80.
[۳] V. Magni; "Resonators for Solid-State Lasers with Large-Volume Fundamental Mode and High Alignment Stability"; *Applied Optics* **25**, No. 1 (1986) 107-117.
[٤] E. Tasal and M. Selami Kilickaya; "Relations for Different Resonators of Nd:YAG and Nd:YAG Lasers"; *Turkish Journal of Physics* **26** (2002) 109-120.
[٥] M. R. Moghaddam, D. Razzaghi, M. Akbari, M. Barzan and M. Ruzbehani; "Experimental Investigation of Thermal Lens Effect in a Flashlamp Pumped CTH:YAG Laser Rod"; *Optik* **247** (2021) 167826.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

دینامیک درهم‌تنیدگی دو اتم متحرک در داخل یک کاواک نشتی: اتلاف دو فوتونی

تقی‌پور ، جواد[۱] ؛ مجاوری ، بشیر[۱] ؛ دهقانی ، علیرضا[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید مدنی آذربایجان، تبریز

[۲] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه پیام‌نور، تهران

چکیده

در این مقاله دینامیک درهم‌تنیدگی بین دو اتم متحرک در برهم‌کنش با میدان کوانتیده کاواک نشتی از طریق یک فرآیند دوفوتونی و در حضور برهم‌کنش دوقطبی ـ دوقطبی و آیزینگ بین کیوبیت ها را بررسی می‌کنیم. نشان خواهیم داد که در رژیم مارکوفی برخلاف رژیم غیرمارکوفی سرعت کیوبیت‌ها و برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی و آیزینگ بین کیوبیت‌ها تأثیر چشم‌گیری در حفظ درهم‌تنیدگی سامانه دارند.

واژه های کلیدی: *درهم‌تنیدگی ، حرکت اتمی،اتلاف دوفوتونی، برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی، برهم‌کنش آیزینگ، رژیم مارکوفی و غیرمارکوفی .*

Entanglement dynamics of two moving atoms inside a leaky cavity: two photon relaxation

Taghipour, Javad[1]; Mojaveri, Bashir[1] ; Dehghani, Alireza[2]

[1] Department of Physics, Faculty of Science, Azarbaijan Shahid Madani University, Tabriz
[2] Department of Physics, Faculty of Science, Payame Noor University, Tehran

Abstract

In this paper, we investigate the entanglement dynamics of two moving atoms interacting with the quantum field of a leakage cavity through a two-photon relaxation in the presence of dipole-dipole and Ising interactions between qubits. We show that in the Markovian regime, unlike the non-Markovian, the speed of the qubits, the dipole-dipole and Ising interactions between the qubits have a significant effect on maintaining the entanglement of the system.

***Keywords**: Entanglement, Atomic motion, Two-photon relaxation, Dipole-dipole interaction, Ising interaction, Markovian and non-Markovian regime.*

PACS No. 30

مقدمه

درهم‌تنیدگی کوانتومی یکی از جالبترین جنبه‌های غیرکلاسیکی مکانیک کوانتومی می‌باشد و در بسیاری از فرآیندهای نظریه‌ی اطلاعات کوانتومی مانند فرابرد کوانتومی ، رمزنگاری کوانتومی، شبیه سازی کوانتومی وغیره کاربرد وسیعی پیدا کرده است[۱-٤]. سامانه‌های کوانتومی باز به دلیل برهم‌کنش با محیط اطراف دچار واهمدوسی شده و در نتیجه درهم‌تنیدگی‌های سامانه به مرور زمان از بین می‌روند. از این رو مطالعه دینامیک درهم‌تنیدگی سامانه‌های کوانتومی باز برای اتخاذ یک راهبرد مناسب برای حفظ آن لازم و ضروری می‌باشد.

در این مقاله دینامیک درهم‌تنیدگی در یک سامانه کوانتومی واقعی شامل دو اتم دوترازی (کیوبیت) یکسان برهم‌کنشی با یک کاواک اتلافی از طریق گذار دوفوتونی را در دو رژیم مارکوفی و غیرمارکوفی مطالعه می‌کنیم. فرض می‌کنیم کیوبیت‌ها در حال حرکت می‌باشند و برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی و آیزینگ بین آنها وجود دارد.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مدل و معادلات اساسی

در این مدل، ما یک سامانه‌ی اتم-کاواک متشکل از دوکیوبیت یکسان که از طریق برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی و آیزینگ به هم جفت شده‌اند را در نظر می‌گیریم. فرض می‌کنیم کیوبیت‌ها در داخل یک کاواک در برهم‌کنش با میدان کوانتیده کاواک از طریق اتلاف دوفوتونی هستند. همچنین فرض می‌کنیم کیوبیت‌ها در امتداد محور z کاواک با سرعت ثابت v در حرکت هستند. هامیلتونی کلی سامانه تحت تقریب موج چرخان (RWA) به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$H = H_0 + H_{int} + H_{dd} + H_I \qquad (۱)$$

که در آن

$$H_0 = \sum_{i=1}^{2} \omega_0 \sigma_+^{(i)} \sigma_-^{(i)} + \sum_k \omega_k a_k^\dagger a_k \qquad (۲)$$

$$H_{int} = \sum_{i=1}^{2} \sum_k \alpha_i g_k f_k(z)^2 a_k^2 \sigma_+^{(i)} + H.c. \qquad (۳)$$

$$H_{dd} = D(\sigma_+^{(1)}\sigma_-^{(2)} + \sigma_-^{(1)}\sigma_+^{(2)}) \qquad (۴)$$

$$H_I = 2J\sigma_z^{(1)}\sigma_z^{(2)}. \qquad (۵)$$

در روابط بالا ، $\sigma_z^{(i)}$ ، $\sigma_+^{(i)}$ و $\sigma_-^{(i)}$ به ترتیب عملگرهای وارونی، بالابرنده و پایین آورنده کیوبیت i-ام با فرکانس ω_0 و $a_k(a_k^\dagger)$ عملگر فنا (خلق) مد k-ام کاواک با فرکانس ω_k می باشد. پارامترهای J و D به ترتیب شدت برهم‌کنش آیزینگ و دوقطبی-دوقطبی بین کیوبیت‌ها و g_k ثابت جفت‌شدگی بین کیوبیت‌ها و مد k-ام کاواک است. α_i کمیت حقیقی و بدون بعدی است که مرتبط با مکان نسبی کیوبیت i-ام می‌باشد و $f_k(z)$ تابع شکل حرکت کیوبیت‌ها در داخل کاواک را توصیف می‌کند و با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود:

$$f_k(z) = f_k(vt) = \sin[\omega_k(\beta t - \Gamma)] \qquad (۶)$$

که در آن $\beta = v/c$ و $\Gamma = L/c$.

با فرض این‌که فقط یک برانگیختگی در کل سامانه وجود دارد، حالت اولیه سامانه را می‌توان به شکل زیر نوشت:

$$|\psi(0)\rangle = c_1(0)|e,g\rangle|0\rangle_R + c_2(0)|g,e\rangle|0\rangle_R \qquad (۷)$$

که در آن $|0\rangle_R$ حالت خلأ کاواک می‌باشد. در نتیجه، تحول زمانی سامانه با رابطه زیر داده می‌شود:

$$|\psi(t)\rangle = c_1(t)e^{-i(\omega_0-2J)t}|e,g\rangle|0\rangle_R + c_2(t)e^{-i(\omega_0-2J)t}|g,e\rangle|0\rangle_R + \sum_k c_k(t)e^{-i(2\omega_k-2J)t}|g,g\rangle|2_k\rangle_R \qquad (۸)$$

که حالت $|2_k\rangle_R$، حالتی از میدان کاواک با دوبرانگیختگی در مد K-ام می‌باشد. حال با حل معادله شرودینگر وابسته به زمان، معادلات دامنه احتمال به شکل زیر به دست می‌آیند:

$$\dot{c_1}(t) = -2\int_0^t dt' F(t,t')(\alpha_1{}^2 c_1(t') + \alpha_1\alpha_2 c_2(t')) - iDc_2(t) \qquad (۹)$$

$$\dot{c_2}(t) = -2\int_0^t dt' F(t,t')(\alpha_1\alpha_2 c_1(t') + \alpha_2{}^2 c_2(t')) - iDc_1(t) \qquad (۱۰)$$

که $F(t,t')$ تابع همبستگی می‌باشد وبه صورت زیر بیان می‌شود:

$$F(t,t') = \sum_k |g_k|^2 f_k^2(vt) f_k^2(vt') e^{-i(2\omega_k-\omega_0+4J)(t-t')} \qquad (۱۱)$$

در حد پیوسته برای محیط و با انتخاب چگالی طیفی لورنتزی [۵]:

$$J(\omega) = \frac{W^2\lambda}{\pi[(\omega-\omega_0+\delta)^2+\lambda^2]} \qquad (۱۲)$$

شکل صریح تابع همبستگی به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$F(t-t') = \frac{W^2}{8} e^{-\lambda'(t-t')}[\cosh(2\beta\bar{\lambda}(t-t')) + 2] \qquad (۱۳)$$

که در این رابطه $\lambda' = 2\lambda + i(\omega_0 - 2\delta + 4J)$ و $\bar{\lambda} = \lambda + i(\omega_0 - \delta)$ می‌باشد. در اینجا δ نامیزانی بین فرکانس اتمی و فرکانس مرکزی کاواک و پارامتر λ پهنای توزیع لورنتزی را نشان می دهد که کمیت $\frac{1}{\lambda}$ زمان همبستگی منبع می باشد و وزن W متناسب با فرکانس رابی خلأ است. ممکن است دو رژیم برای دینامیک کیوبیت ها اعمال شود، یعنی رژیم جفت‌شدگی ضعیف یا

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

قوی. در رژیم جفت‌شدگی ضعیف ($\lambda < 2W$) ، رفتار سامانه مارکوفی است و یک فرآیند زوال رخ می دهد. در حالی که در رژیم جفت‌شدگی قوی ($\lambda > 2W$) احیای درهم‌تنیدگی با برخی نوسانات رخ می دهد که از حافظه سامانه‌ی غیرمارکوفی نشأت می گیرد. در ادامه پارامترهای بدون بعد زیر را تعرف می-کنیم: ثابت کوپلاژ جمعی $\alpha_T = \sqrt{\alpha_1^2 + \alpha_2^2}$، شدت‌های کوپلاژ نسبی $r_{1(2)} = \frac{\alpha_{1(2)}}{\alpha_T}$، و فرکانس رابی خلأ $\mathcal{R} = W\alpha_T$.

با اعمال تبدیلات لاپلاس به معادلات (۹) و (۱۰) ،دامنه‌های $c_1(t)$ و $c_2(t)$ به‌طور کلی بدست می‌آیند. با توجه به اینکه شکل صریح دامنه‌ها پیچیده است آن‌ها را در اینجا گزارش نمی‌دهیم.

دینامیک درهم‌تنیدگی

اکنون به دینامیک درهم‌تنیدگی دو کیوبیت می‌پردازیم. برای تعیین میزان درهم‌تنیدگی سامانه‌های کوانتومی ، سنجه‌های مختلفی ارائه شده است. ما در این پژوهش از سنجه تلاقی [٦] استفاده می‌کنیم. این سنجه برای حالتی که کیوبیت‌ها جداپذیر هستند برابر صفر و برای حالتی که بیشینه درهم‌تنیده هستند برابر یک می‌باشد که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$C(t) = \max\{0, \sqrt{\lambda_1} - \sqrt{\lambda_2} - \sqrt{\lambda_3} - \sqrt{\lambda_4}\} \qquad (١٤)$$

که $\lambda_i (i = 1,2,3,4)$ ویژه مقادیر به ترتیب نزولی ماتریس هرمیتی $\rho(\sigma_y \otimes \sigma_y)\rho^*(\sigma_y \otimes \sigma_y)$ هستند که ρ^* همیوغ مختلط ρ است. با استفاده از بردار حالت کلی سامانه (رابطه ۸)، می توان با رد گرفتن روی درجات آزادی محیط، ماتریس چگالی کاهیده اتمی را در پایه های $\{|e,e\rangle, |e,g\rangle, |g,e\rangle, |g,g\rangle\}$ در زمان t به دست آورد:

$$\rho(t) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & |c_1(t)|^2 & c_1(t)c_2^*(t) & 0 \\ 0 & c_1^*(t)c_2(t) & |c_2(t)|^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1-|c_1(t)|^2-|c_2(t)|^2 \end{pmatrix} \qquad (١٥)$$

پس از انجام محاسبات، سنجه تلاقی این سامانه به صورت زیر به دست می آید:

$$C(t) = 2|c_1(t)c_2^*(t)| \qquad (١٦)$$

در ادامه، برای بحث بهتر درباره تحول زمانی درهم‌تنیدگی مطالعه خود را به وضعیتی محدود می کنیم که کیوبیت ها در ابتدا در حالت بیشینه درهمتنیده هستند:

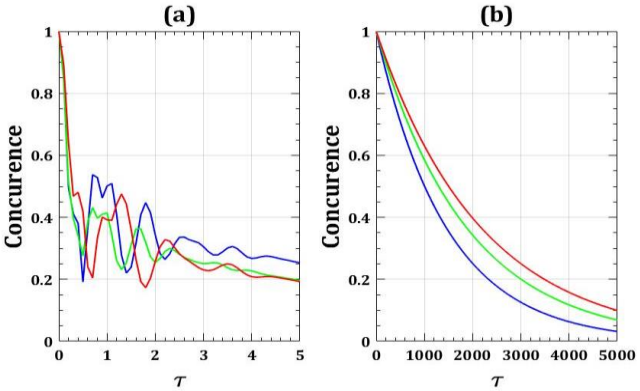
$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e,g\rangle - |g,e\rangle) \qquad (١٧)$$

حال دینامیک درهم‌تنیدگی کیوبیت‌های متحرک را برحسب زمان بدون بعد $\tau = \lambda t$ بررسی می کنیم. پارامتر $R = \frac{\mathcal{R}}{\lambda}$ به ما اجازه می‌دهد تا دو رژیم مارکوفی و غیرمارکوفی را به ترتیب با قیود $R \gg 1$ و $R \ll 1$ تشخیص دهیم. در شکل ۱ کمیت تلاقی بر حسب پارامتر بدون بعد $\tau = \lambda t$ در دو رژیم غیرمارکوفی(R=10) و مارکوفی (R=0.1) و به ازای مقادیر مختلف سرعت کیوبت‌ها رسم شده است. با توجه به شکل درمی-یابیم که در رژیم غیرمارکوفی با افزایش سرعت کیوبیت‌ها، درهم-تنیدگی در زمانهای کوتاهتری از بین می‌رود و سرعت اثر منفی در درهم‌تنیدگی سامانه دارد ولی برعکس، در رژیم مارکوفی با افزایش سرعت کیوبیت‌ها درهم‌تنیدگی مدت زمان طولانی‌تری زنده می-ماند و سرعت اثر مثبت در درهم‌تنیدگی سامانه دارد.

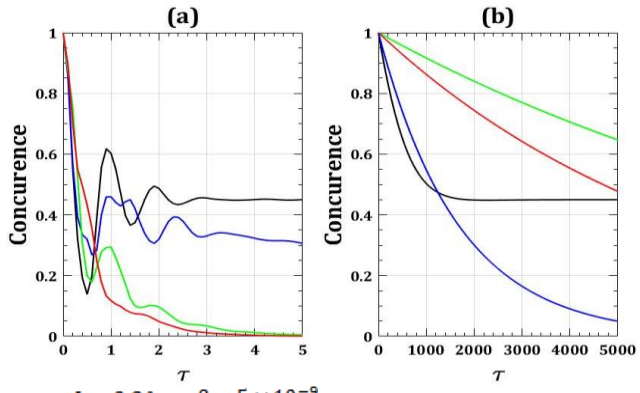
شکل ۲ تحول زمانی تلاقی را برای D های مختلف نشان می‌دهد. با توجه شکل مشاهده می‌شود که چه در رژیم غیرمارکوفی و چه در رژیم مارکوفی برای مورد D=0، تلاقی پس از گذشت زمان مشخصی به یک مقدار پایا می‌رسد اما هنگامی که برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی را در نظر بگیریم سامانه دیگر حالت پایایی ندارد و در زمان‌های طولانی به سمت صفر میل می‌کند. با افزایش D در رژیم غیر مارکوفی مدت زمانی که درهم‌تنیدگی در سامانه حفظ می‌شود کاهش می یابد ولی در رژیم مارکوفی D اثر متفاوتی در درهم‌تنیدگی سامانه دارد به این ترتیب که با افزایش D تا مقدار ۷ درهم‌تنیدگی برای مدت زمان طولانی‌تری حفظ می‌شود ولی با افزایش بیشتر D، مدت زمان زنده ماندن درهم‌تنیدگی کاهش می-یابد.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

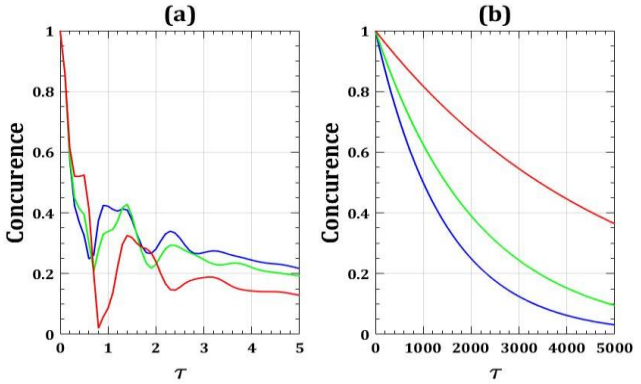
در نهایت در شکل ۳ تأثیر J–های مختلف در درهم‌تنیدگی سامانه در رژیم‌های غیرمارکوفی و مارکوفی بررسی شده است. همان‌طور که از شکل ۳ پیداست در رژیم غیرمارکوفیJ نقش منفی در حفظ درهم‌تنیدگی دارد ولی در رژیم مارکوفی نقش J سازنده است.



شکل۱ : تحول زمانی کمیت تلاقی به ازای $D = 1.5\lambda$ و $J = 0.2\lambda$ در رژیم-های غیرمارکوفی (شکل a) و مارکوفی (شکل b) به ازای مقادیر متفاوت سرعت کیوبیت‌ها: $\beta = 0$ (آبی)، $\beta = 3 \times 10^{-9}$ (سبز)و $\beta = 15 \times 10^{-9}$ (قرمز). سایر پارامترها عبارتند از: $\gamma_1 = 0.3$ و $\omega_0 = 3 \times 10^9 \lambda$ و $\delta = \omega_0/2$.



شکل۲ : تحول زمانی کمیت تلاقی به ازای $\beta = 5 \times 10^{-9}$ و $J = 0.2\lambda$ در رژیم‌های غیرمارکوفی (شکل a) و مارکوفی (شکل b) به ازای مقادیر $D = 0$ (سیاه)، $D = 1\lambda$ (آبی)، $D = 7\lambda$ (سبز) و $D = 12\lambda$ (قرمز). سایر پارامترها عبارتند از: $\gamma_1 = 0.3$ و $\omega_0 = 3 \times 10^9 \lambda$ و $\delta = \omega_0/2$.



شکل۳ : تحول زمانی کمیت تلاقی به ازای $\beta = 5 \times 10^{-9}$ و $D = 1.5\lambda$ در رژیم‌های غیرمارکوفی (شکل a) و مارکوفی (شکل b) به ازای مقادیر $J = 0$ (آبی)، $J = 0.2\lambda$ (سبز) و $J = 0.7\lambda$ (قرمز). سایر پارامترها عبارتند از: $\gamma_1 = 0.3$ و $\omega_0 = 3 \times 10^9 \lambda$ و $\delta = \omega_0/2$.

نتیجه گیری

در این مقاله، ما دینامیک درهم‌تنیدگی دو کیوبیت متحرک در برهم‌کنش با میدان کوانتیزه کاواک از طریق یک فرآیند دو فوتونی و در حضور برهم‌کنش دوقطبی–دوقطبی و آیزینگ بین کیوبیت‌ها را مطالعه کردیم. ما حالت اولیه سامانه را یک حالت بیشینه درهم‌تنیده فرض کردیم و اثرات پارامترهای فیزیکی مختلف را در دینامیک درهم‌تنیدگی بررسی کردیم و مشاهده کردیم که تمام پارامترهای مورد مطالعه تأثیر قابل توجهی در رفتار درهم‌تنیدگی سامانه دارند. در رژیم مارکوفی هر سه پارامتر مورد بررسی یعنی سرعت کیوبیت‌ها و شدت برهم‌کنش دوقطبی–دوقطبی و آیزینگ در حفظ درهم‌تنیدگی سامانه نقش مثبت ولی در رژیم غیرمارکوفی نقش منفی ایفا می‌کنند . همچنین مشخص شد که به ازای D=0 تلاقی سامانه پس از گذشت مدت زمان مشخصی به یک حالت پایا می‌رسد.

مرجع‌ها

[۱] S.L. Braunstein, and A. Mann, Phys. Rev. A. 51, R1727 (1995).
[۲] A.K. Ekert, Phys. Rev. Lett. 67, 661 (1993).
[۳] V. Scarani, S. Lblisdir, N. Gisin, and A. Acin, Rev. Mod. Phys. 77, 1225 (2005).
[٤] T. Richter, and W. Vogel, Phys. Rev. A. 76, 053835 (2007).
[٥] H. P. Breuer and F. Petruccione: The Theory of Open Quantum Systems. Oxford University Press, Oxford (2002).
[٦] W. K. Wootters, Phys. Rev. Lett. 80, 2245 (1998).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

جت‌های اخترفیزیکی در سیستم‌های دوتایی

سپهوند، مصطفی [1] ؛ شیخ‌نظامی، سمیه [2و1]

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

[2] پژوهشکده نجوم، پژوهشگاه دانش‌های بنیادی (IPM)، تهران

چکیده

در این پژوهش به بررسی پرتاب جت‌ها و جریان‌های خروجی از اجرام‌ستاره‌ای‌جوان YSO و نیز در سیستم‌های دوتایی پرداخته‌شده است. معادلات وابسته به زمان مگنتوهایدرودینامیکی به وسیله کد PLUTO مورد محاسبه قرار می‌گیرد. یکی از نکات مهم این پژوهش این است که قرص برافزایشی به صورت مرز در نظر گرفته‌شده و به‌طور خاص، تاثیر پارامترهای قرص و نیز ستاره همدم بر شار جرمی جت مورد بررسی قرار می‌گیرد.

واژه‌های کلیدی: *جت‌ها و جریان‌های خروجی- اجرام‌ستاره‌ای‌جوان- مگنتوهایدرودینامیکی- قرص برافزایشی- سیستم‌های دوتایی*

Astrophysical Jets in Binary Systems

Sepahvand, Mostafa[1]; Sheikhnezami, Somayeh[1,2]

[1] Department of Physics, Institute for Advanced Studies in Basics Sciences, Zanjan
[2] School of Astronomy, Institute for Research in Fundamental Sciences (IPM), Tehran

Abstract

In this project, we investigate the launching of jets and outflows from young stellar objects (YSO) and also in binary systems. Here using PLUTO code, we solve time-dependent magnetohydrodynamic (MHD) equations. One of the important points of this research is that we consider the accretion disk as a boundary and in particular, we study the direct effects of accretion disk's parameters and the companion star on the mass flux of the jet.

***Keywords**: jets and outflows- YSO- MHD- accretion disk- Binary Systems*

PACS NO. 9721+a, 9838Fs, 9858Fd

مقدمه

تاکنون جت‌های اخترفیزیکی در دامنه گسترده‌ای از اجرام نجومی از پیش‌ستاره‌ها تا کهکشان‌ها رصد شده‌اند. به طور کلی جت‌ها راستاهایی از مواد هستند که سرعت زیادی نسبت به فضای اطراف خود دارند. به واسطه انرژی زیاد، جت‌ها محیط اطراف خود را تحت تاثیر قرار می‌دهند. این اجرام باعث انتقال انرژی، جرم و تکانه از منبع شکل شکل‌گیری خود به محیط میان‌ستاره‌ای و میان‌کهکشانی می‌شوند. جت‌های مورد بحث در این پژوهش ناشی از اجرام‌ستاره‌ای‌جوان می‌باشند. سرعت جت‌های ستاره‌ای بین 100 تا 500 کیلومتر بر ثانیه است، ابعاد آن‌ها از مرتبه چند پارسک و جرم منبع این اجرام از مرتبه جرم خورشید می‌باشد. منشاء شکل‌گیری جت‌ها ناشی از قرص برافزایشی است. مطالعات نشان

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

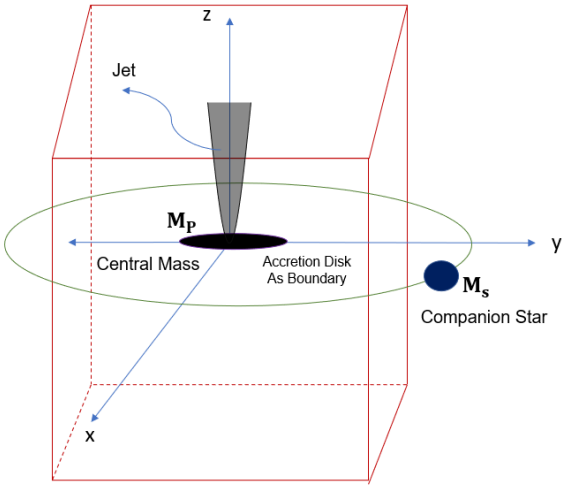
می‌دهد که یک جت در لایه‌های داخلی قرص برافزایشی شکل می‌گیرد و به فضا پرتاب می‌شود.[1]

جت‌های اخترفیزیکی، در موضوعات متعددی از جمله فرآیند پرتاب جت، انتشار جت و تعامل جت با محیط اطراف آن مورد بررسی قرار گرفته‌اند.

تنظیم الگو

در این تحقیق به نحوه‌ی شکل‌گیری جت‌ها با استفاده از شبیه‌سازی‌های عددی پرداخته شده است. پیدایش جت‌های مورد بررسی در شرایط مختلف در حضور میدان مغناطیسی و نیز در سیستم‌های دوتایی بررسی می‌شود. الگوهای متفاوتی وجود دارد که قرص برفزایشی در مرز وارد می‌شود[2,3,4] یا قرص برافزایشی هم جزئی از شبیه‌سازی می‌باشد[5,6]. در این الگو، پیدایش جت تحت شرایط اولیه‌ای متفاوت با قرص برافزایشی که به صورت یک مرز در مسأله وارد می‌شود، مورد مطالعه قرار می‌گیرد. تمرکز این تحقیق بر روی ناحیه شکل‌گیری جت (Launching Area) است، لذا نزدیک به پیش ستاره هستیم. در سال 2018 شیخ نظامی و فنت[7] در یک مقاله نشان دادند که از ستاره همدم، دو اثر به صورت همزمان بر سیستم قرص–جت تحمیل می‌شود. مورد اول به این صورت است که حضور ستاره همدم بر قرص تاثیر می‌گذارد و سبب تغییراتی در قرص می‌شود. زمانی که قرص مواد را منتقل می‌کند، این مواد خصوصیاتی همچون اثرات کشندی (Tidal Effect) را از قرص دریافت می‌کنند و همراه با خود بالا می‌برند. مورد دوم اینگونه است که ستاره همدم به صورت مستقیم بر خود جت تاثیر می‌گذارد. حال در این تحقیق سوال اصلی این است که میزان اثر ستاره همدم به صورت مستقیم بر روی جت چگونه است و مقدار این تاثیرات چقدر است؟

برای سبک تر کردن شبیه‌سازی و بزرگنمایی برروی جت، قرص را به صورت مرز در نظر می‌گیریم. برای تفهیم بیشتر موضوع، طرح اولیه‌ای رسم شده که شامل جت و قرص به همراه یک همدم است که آن را در (شکل 1) می‌بینیم. ناحیه محاسباتی یک شبکه مستطیلی می‌باشد که ابعاد آن $(r \times z) = (50 \times 100)\ r_i$ می‌باشد.

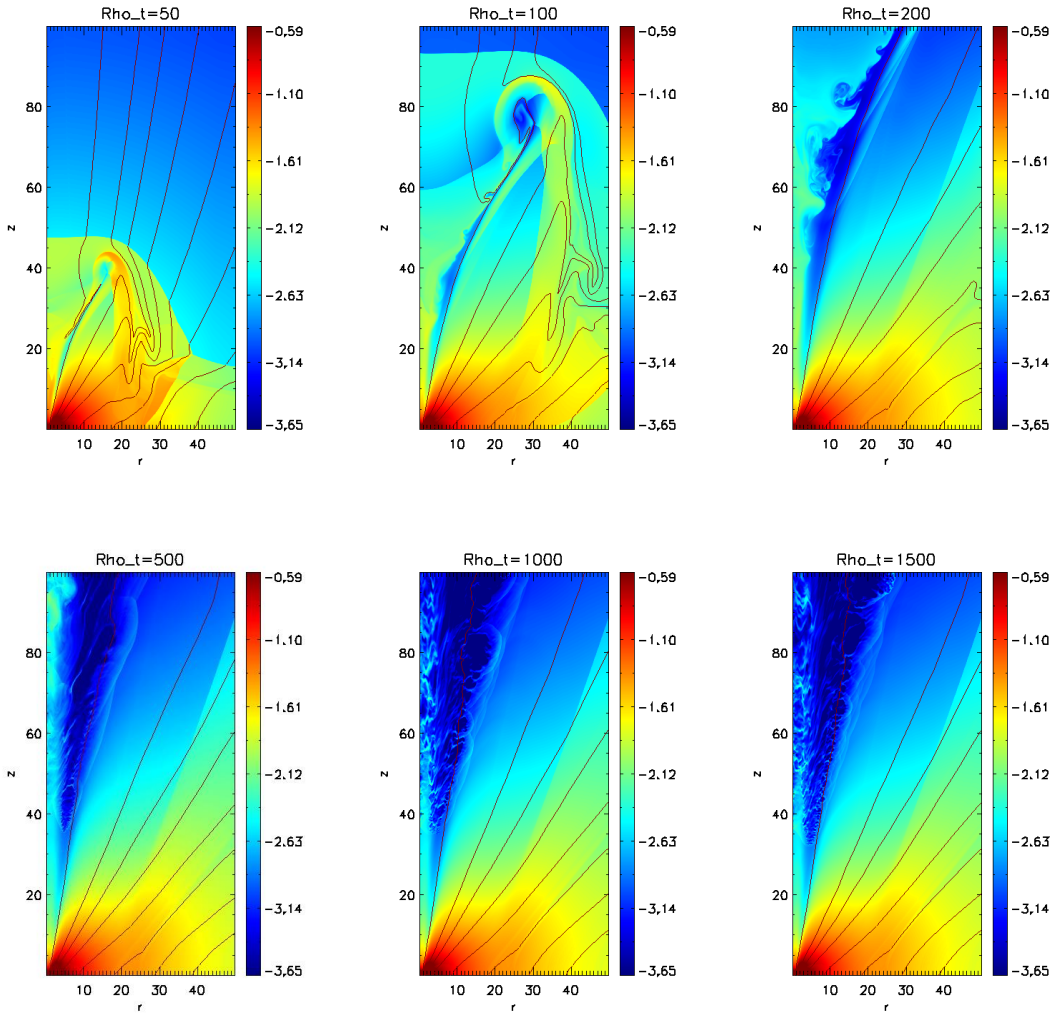


شکل 1 : نمایشی از طرح اولیه‌ی الگوی مورد نظر: یک سیستم دوتایی، متشکل از یک جرم ثانویه M_S و یک جرم اولیه M_P که توسط یک قرص برافزایشی احاطه شده است.

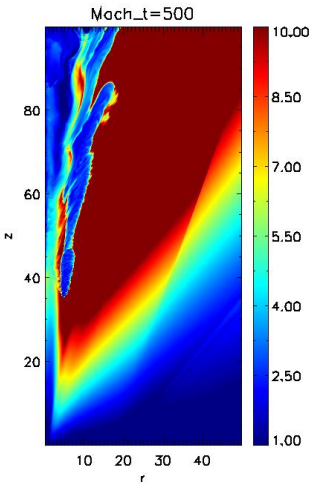
شبیه‌سازی مرجع

در این پژوهش، فواصل بر حسب واحدهایی از شعاع داخلی قرص r_i و سرعت‌ها برحسب سرعت کپلری در شعاع داخلی قرص $V_{Kep,i}$ بیان می‌شوند. براین اساس واحد زمان $t_i = \frac{r_i}{V_{Kep,i}}$ به صورت تعریف می‌شود. ابتدا یک شبیه‌سازی مرجع برای پیدایش جت از مرز، با شرایط اولیه خاص تا زمان دینامیکی $t = 1500\ t_i$ انجام شد که در این زمان جت تشکیل شده و به حالت پایا می‌رسد. به عنوان نتیجه‌کلی در (شکل 2) می‌توان دید که یک جریان خروجی قوی و پایدار از ناحیه داخلی به صورت یک جت همگرا شروع به توسعه یافتن می‌کند و در زمان‌های مختلف تحول این جت تا رسیدن به حالت پایدار قابل مشاهده است. این جت به سرعت‌های بیش‌تر از سرعت‌صوت در محیط‌های مگنتوهایدرودینامیکی دست می‌یابد. یک جبهه ضربه‌ای قوسی شکل در حد فاصل بین جریان خروجی ماده و محیط اطراف شکل می‌گیرد که تحول و پهن‌شدگی آن از زمان ابتدایی تا $t = 100\ t_i$ به خوبی قابل تشخیص است. در ابتدا پلاسما به صورت مغناطیس–گریز از مرکز شتاب می‌گیرد و سرعت قابل‌توجهی به دست می‌آورد و همزمان با انتشار جریان خروجی ماده، جبهه ضربه‌ای قوسی شکل ناحیه محاسباتی را جاروب کرده و چگالی این ناحیه را تحت تاثیر قرار می‌دهد.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل2 : در این تصویر تحول زمانی ساختار جت برای شبیه‌سازی مرجع (Case1) نمایش داده شده است. رنگ‌های زمینه تحول لگاریتمی‌چگالی‌جرمی را در 6 زمان متفاوت به همراه خطوط میدان مغناطیسی در 8 سطح نمایش می‌دهد.



. شکل3 : در این تصویر تحول زمانی عدد ماخ برای شبیه‌سازی مرجع (Case1) نمایش داده شده است

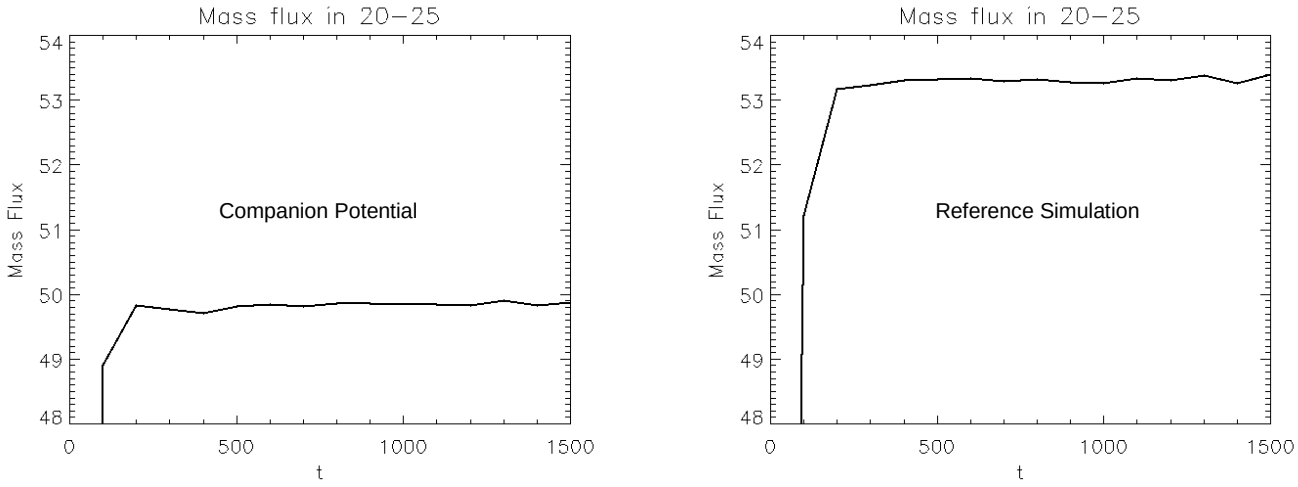
با توجه به رابطه $C_s = \sqrt{\frac{\gamma P_i}{\rho_i}}$ سرعت صوت در محیط جت‌های اخترفیزیکی ستاره‌ای از مرتبه $10\frac{km}{s}$ است. از آنجایی که عدد ماخ از رابطه بین سرعت قطبی و سرعت صوت $M_{Mach} = \frac{V_{Pol}}{C_s}$ به دست می‌آید، هرچقدر این عدد بزرگتر از یک باشد نشان دهنده فراصوت بودن جت مد نظر است که در (شکل3) این تفاوت به خوبی با رنگ قرمز قابل مشاهده است و زمانی که عدد ماخ از مرتبه 10 شود یعنی سرعت جت 10 برابر سرعت صوت است .

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

شبیه‌سازی جت همراه با تاثیر ستاره همدم

برای نمونه یکی از شبیه‌سازی‌هایی که در آن جت در یک سیستم دوتایی قرار می‌گیرد، بررسی می‌شود. اندازه‌ی ناحیه محاسباتی، همچون شبیه‌سازی مرجع، یک شبکه مستطیلی در ابعاد $(r \times z) = (50 \times 100)\ r_i$ و مدت زمان اجرای شبیه‌سازی $t = 1500\ t_i$ است، با این تفاوت که پتانسیل‌گرانشی ستاره همدم به شبیه‌سازی اضافه شده و بر جت و میدان آن اثر می‌گذارد. جرم ستاره همدم را برابر با ستاره منبع در نظر گرفته و ستاره همدم در فاصله $r = 70\ r_i$ قرار گرفته است، ستاره همدم نسبت به جرم منبع ارتفاعی ندارد و ارتفاع آن صفر است. اکنون شار جرمی که یکی از مهم ترین عوامل جت‌ها است در این شبیه‌سازی مورد بررسی قرار می‌گیرد.آهنگ خروج جرم توسط جت از قرص برافزایشی به شار جرمی می‌گویند و رابطه آن به شکل $\dot{M}_{ejec} = -2\pi r \int \rho\, v_z dr$ است. آنچنان که نشان داده شده است آهنگ خروج جرم در کل سطح مقطع جت در ارتفاع $z = 25\ r_i$ است.

در (شکل 4 ب) به وضوح کم شدن نرخ شار جرمی مختص به شبیه‌سازی با پتانسیل گرانشی ستاره همدم نسبت به نمودار شار جرمی شبیه‌سازی مرجع قابل مشاهده است. در اینجا به نظر می‌رسد که این کم شدن نرخ شار جرمی نشان از چاه پتانسیل ستاره همدم است.



شکل4 : الف) در تصویر سمت راست شار جرمی ماده در واحد کد برای شبیه‌سازی مرجع (Case1) در زمان $t = 1500\ t_i$ قابل مشاهده است؛ ب) تصویر سمت چپ شار جرمی جت در یک سیستم دوتایی است.

مراجع

[1] de Gouveia Dal Pino, E. M. 2005, Adv. Space Res., 35, 908
[2] Ouyed, R. & Pudritz, R. E. 1997, ApJ, 482, 712
[3] Porth, O. & Fendt, C. 2010, ApJ, 709, 1100
[4] Vaidya, B., Fendt, C., Beuther, H., & Porth, O. 2011, ApJ, 742, 56
[5] Sheikhnezami, S., Fendt, C., Porth, O., Vaidya, B., & Ghanbari, J. 2012, ApJ, 757, 65
[6] Sheikhnezami, S. & Fendt, C. 2022, Apj, 925, 161
[7] Sheikhnezami, S. & Fendt, C. 2018, ApJ, 861, 11

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی جهان‌شمولی حاصلضرب آنتروپی‌ها در سیاه‌چاله‌های غیرتکین

حنیف گلچین[1] ؛ مینو پورکمال زاده[1]

[1] دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید باهنر، کرمان

چکیده

برای سیاهچاله هایی با بیش از یک افق رویداد، معلوم شده است که حاصلضرب آنتروپی افق‌های رویداد درونی و بیرونی، مستقل از جرم سیاه‌چاله است و فقط به بارهای کوانتیده آن نظیر تکانه زاویه ای و بار الکتریکی بستگی دارد. به این ویژگی جهان‌شمولی حاصلضرب آنتروپی‌ها گفته می شود. البته این نتیجه قابل گسترش به همه سیاه‌چاله ها نیست و مثالهای نقضی برای آن پیدا شده است. در این مقاله سیاه‌چاله های غیرتکین را از دیدگاه ویژگی جهان‌شمولی مورد بررسی قرار داده ایم و مشاهده می کنیم که در این سیاه چاله ها نیز ویژگی جهان‌شمولی برای برخی موارد برقرار است و برای تعدادی دیگر نقض می شود.

Universality of Entropy Product in the Regular Black Holes

Golchin, Hanif[1] ; Minoo Pourkamalzadeh[1]

[1] *Faculty of Physics, Shahid Bahonar University, Kerman*

Abstract

It has been observed that for multi horizon black holes, the entropy product of the inner and outer horizons is "universal" which means that the entropy product is mass independent and it depends to the quantized charges of the black hole as angular momentum and electric charge. This is not a generic property of black holes, due to some counter examples. In this paper, we investigate the universality in the case of regular black holes. We observe that, similar to other black holes, the universality is true for some solutions and violates for some others.

PACS No. 3,4, 04.50.Gh, 04.70.Dy

1- مقدمه

مطالعه سیاه چاله ها علاوه بر اینکه از دیدگاه کلاسیکی دارای اهمیت و جذابیت است، از دیدگاه کوانتمی نیز اهمیت فراوانی دارد. نخستین بار استرومینجر و وفا [1] با شمارش میکروحالتهای یک سیاه‌چاله در نظریه ریسمان توانستند آنتروپی آن (که در توافق با آنتروپی بکنشتاین-هاوکینگ بود) را حساب کنند. این آنتروپی که رابطه آن با مساحت افق رویداد سیاه چاله به شکل $S = A/4G$ است (G ثابت جهانی گرانش می باشد و در ادامه فرض می‌کنیم $G=1$)، به صورت گسسته تغییر می کند به عبارت دیگر مساحت افق رویداد سیاه‌چاله یک کمیت گسسته است[2]. همچنین حدسهایی در نظریه ریسمان مبنی بر گسسته بودن حاصلضرب مساحت افقهای یک سیاه چاله وجود دارد[3].

در سالهای اخیر بررسی حاصلضرب مساحت افقها برای انواع سیاه‌چاله‌ها مورد توجه قرار گرفته است. نشان داده شده است که برای برخی از جواب های سیاه چاله ای، حاصلضرب مساحت افقها به شکل $A_+A_- = (8\pi)^2 N$ است [4] که در آن N فقط به بارهای کوانتیده آن (نظیر تکانه زاویه ای و بار الکتریکی) بستگی دارد و مستقل از جرم است که به این ویژگی، جهان شمولی (universality) حاصلضرب مساحت‌ها (آنتروپی‌ها) می گویند. البته این ویژگی تمام سیاه‌چاله‌ها نیست و چند مثال نقض برای آن وجود دارد. در این مقاله پس از اشاره به تعدادی از جوابهای دارای ویژگی جهان‌شمولی و همچنین تعدادی از موارد نقض آن، به بررسی این ویژگی در مورد سیاه‌چاله‌های غیرتکین (regular) خواهیم پرداخت.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

2- جهان‌شمولی حاصلضرب آنتروپی‌ها ومثالهای نقض آن

1- سیاه چاله Kerr-Newman

این جواب توصیف کننده یک سیاه‌چاله چرخان با بار الکتریکی در فضا-زمان چهار بعدی است که با سه پارامتر جرم M، تکانه زاویه‌ای J و بار الکتریکی Q مشخص می‌شود. حاصلضرب آنتروپی افق های درونی و بیرونی این جواب برابر است با [4]

$$S_+S_- = \pi^2(4J^2+Q^4) \qquad (1)$$

که مستقل از جرم سیاه چاله است.

2-سیاه‌چاله Myers-Perry

این جواب، سیاه‌چاله چرخان در ابعاد بالاتر از چهار را توصیف می‌کند که برای آنها بیش از یک محور چرخش وجود دارد. مثلا در فضا-زمان پنج بعدی، سیاه‌چاله می‌تواند دو چرخش در راستای محورهای (متعامد) ϕ و ψ داشته باشد و بنابراین با سه پارامتر M ، J_ϕ و J_ψ داده می شود. حاصلضرب آنتروپی‌های آن [5]

$$S_+S_- = 4\pi^2 J_\phi J_\psi \qquad (2)$$

است که مستقل از جرم سیاه‌چاله می باشد.

در [8,7,6] موارد دیگری از جوابهایی با ویژگی جهان‌شمولی ذکر شده است که برای رعایت خلاصه نویسی از آوردن نتایج آنها پرهیز می‌کنیم. برخلاف مثالهای بالا، سیاه‌چاله های دیگری داریم که در آنها حاصلضرب آنتروپی ها مستقل از جرم نیست. چند مورد از این جوابها که ویژگی جهان‌شمولی را ندارند، در زیر آمده است:

1- سیاه‌چاله Myers-Perry در فضا-زمان شش‌بعدی و بالاتر [5]

2- سیاه‌چاله‌ها در گرانش انحناهای بالاتر [9]

3- سیاه‌چاله‌های حاوی بار NUT [10].

از طرفی در [11] نشان داده شده است که ویژگی جهان‌شمولی، با بار مرکزی نظریه میدان دوگان به سیاه‌چاله در ارتباط است بنابراین مساله بررسی ویژگی جهان‌شمولی برای سیاه‌چاله‌ها از این نظر نیز اهمیت پیدا می کند. در ادامه، به بررسی این ویژگی برای سیاه‌چاله‌های غیرتکین (regular black holes) می پردازیم.

سیاه‌چاله‌های غیرتکین، جواب‌هایی هستند که افق رویداد (تکینگی مختصاتی) دارند اما فضا-زمان آنها عاری از تکینگی فیزیکی است. از دیدگاه جهان‌شمولی تاکنون تعداد اندکی از سیاه‌چاله های غیرتکین بررسی شده اند. در [12] نشان داده شده که سیاهچاله Ayon–Beato, Garcia این ویژگی را ندارد و در [13] نشان داده شده که برای دو مورد از جوابهای غیرتکین ویژگی جهان‌شمولی برقرار است.

3- بررسی جهان‌شمولی در سیاه‌چاله‌های غیرتکین

نشان داده شده است که ویژگی جهان‌شمولی درصورتی برای یک سیاه‌چاله وجود دارد که شرط زیر برقرار باشد [6]

$$T_+S_+ = T_-S_- \qquad (4)$$

که در اینجا T_+ و S_+ (T_- و S_-) دما و آنتروپی بر روی افق رویداد بیرونی (درونی) سیاه‌چاله هستند. بنابراین ابتدا با پیدا کردن دما و آنتروپی برای هر سیاه‌چاله، شرط (4) را بررسی می کنیم و درصورت برقرار بودن این شرط، با محاسبه بارهای فیزیکی سیاه‌چاله فرم ریاضی رابطه جهان‌شمولی را پیدا می کنیم.

3-1 سیاه‌چاله Bardeen

این مورد، نخستین سیاه‌چاله غیرتکین است که در 1968 معرفی شد[14] اما حدود 30 سال طول کشید که معلوم شد این سیاه‌چاله جوابی برای کنش اینشتین جفت شده با الکترودینامیک غیرخطی است. متریک سیاه‌چاله باردین به شکل زیر است که درآن M جرم سیاه‌چاله و q بار تک‌قطبی مغناطیسی است

$$ds^2 = -fdt^2 + \frac{dr^2}{f} + r^2(d\theta^2 + \sin^2\theta d\varphi^2), \qquad (5)$$

$$f = 1 - \frac{2Mr^2}{(r^2+q^2)^{3/2}}$$

افق‌های رویداد از حل معادله $f=0$ بدست می آیند که بزرگترین (کوچکترین) ریشه را با r_+ (r_-) نمایش می دهیم. بنابراین آنتروپی افق‌های درونی و بیرونی عبارتند از

$$S_\pm = \frac{A_\pm}{4} = \pi r_\pm^2 \qquad (6)$$

همچنین دمای سیاه‌چاله برروی افق‌های درونی و بیرونی برابر با

$$T_\pm = \pm\frac{1}{4\pi}\left[\frac{df}{dr}\right]_{r=r_\pm} = \pm\frac{Mr_\pm(r_\pm^2-2q^2)}{(r_\pm^2+q^2)^{5/2}} \qquad (7)$$

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

است. بسادگی می توان چک کرد که شرط (4) در اینجا برقرار نیست و بنابراین سیاه‌چاله باردین ویژگی جهان‌شمولی را ندارد.

2-3 سیاهچاله Hayward

متریک این سیاه‌چاله نیز با عبارت (5) داده می شود اما با تابع متفاوت $f=1-\frac{2Mr^2}{r^3+q^3}$. در اینجا نیز می توان آنتروپی و دمای افق های درونی و بیرونی را به شکل زیر بدست آورد

$$S_\pm=\pi r_\pm^2, \qquad T_\pm=\pm\frac{Mr_\pm(r_\pm^3-2q^3)}{2\pi(r_\pm^3+q^3)} \tag{8}$$

باز هم شرط (4) برآورده نمی شود، بعبارت دیگر سیاه‌چاله هیوارد نیز ویژگی جهان‌شمولی را ندارد.

3-3 سیاه‌چاله‌های چرخان

گسترش سیاه‌چاله‌های Brdeen و Hayward به جوابهایی شامل چرخش در [15] انجام شده است. متریک این جوابها برابر است با

$$\begin{aligned} ds^2&=-Fdt^2+\frac{dr^2}{G}+\Sigma d\theta^2+Hd\phi^2-2Kdtd\phi,\\ F&=\frac{\Pi-a^2\sin^2\theta}{\Sigma}, \quad \Pi=r^2+a^2-2rm(r),\\ G&=\frac{\Pi}{\Sigma}, \quad H=\frac{(r^2+a^2)^2-\Pi a^2\sin^2\theta}{\Sigma}\sin^2\theta,\\ \Sigma&=r^2+a^2\cos^2\theta, \quad K=\frac{2arm(r)\sin^2\theta}{\Sigma}, \end{aligned} \tag{9}$$

که a پارامتر چرخش و $m(r)$ جرم تصحیح شده است که با عبارت زیر داده می شود

$$m(r)=M\left(\frac{r^p}{r^p+r_0^p}\right)^{3/p} \tag{10}$$

سیاه‌چاله‌های Brdeen و Hayward به ترتیب با جایگذاری $p=2$ و $p=3$ در عبارتهای بالا بدست می آیند. به ازای $r_0=0$ داریم $m(r)=M$ و جواب (9) تبدیل می‌شود به سیاه‌چاله Kerr بنابراین r_0 را می توان پارامتر انحراف از جواب Kerr دانست. ما نیازمند محاسبه دما وآنتروپی افق‌های رویداد $r_\pm$ (که از حل معادله $\Pi=0$ بدست می‌آیند) هستیم و برای این کار بهتر است از $\Pi(r_+)=0$ و $\Pi(r_-)=0$، پارامترهای M و a را برحسب $r_\pm$ بدست آوریم. ما پیدا کردیم که برای سیاه‌چاله‌های Brdeen و Hayward شرط (4) برآورده نمی شود یعنی این جوابها ویژگی جهان‌شمولی را ندارند. نتایج بدست آمده برای $T_\pm$ و $S_\pm$ کمی شلوغ هستند و در اینجا آنها را نمایش نداده‌ایم اما برای حالت $r_0\to 0$ (انحراف کوچک از جواب Kerr) می توان بسط تیلور (9) را نوشت و دما و آنتروپی را برای آن پیدا کرد. برای نمونه در سیاه‌چاله Bardeen (p=2) با r_0 کوچک نتایج به شکل زیر است

$$S_+=\frac{\pi r_-(r_-+r_+)(3r_0^2-2r_+^2)}{3r_0^2+2r_-r_+}, \quad S_-=S_+(r_+\leftrightarrow r_-),$$

$$T_+=\frac{(r_+-r_-)[r_0^2(r_-+2r_+)+\frac{2}{3}r_-r_+^2]}{4\pi r_-r_+(r_-+r_+)(r_0^2-\frac{2}{3}r_+^2)}, \quad T_-=-T_+(r_+\leftrightarrow r_-),$$

که بوضوح شرط (4) را برآورده نمی کنند.

4-3 سیاه‌چاله Frolov

متریک استاتیک متقارن کروی (5) را می توان به شکل زیر نوشت

$$ds^2=-fdv^2+2dvdr+r^2(d\theta^2+\sin^2\theta d\varphi^2), \tag{11}$$

در [17] یک سیاه‌چاله غیرتکین باردار معرفی شده است با تابع

$$f=1-\frac{(2Mr-q^2)r^2}{r^4+(2Mr+q^2)\ell^2} \tag{12}$$

که M جرم سیاه‌چاله و q بار آن است. پارامتر ℓ در اینجا انحراف ازسیاه‌چاله رایسنر-نوردستروم (RN) را نمایش می‌دهد و با $\ell=0$ جواب RN بازیابی می‌شود. متریک (11) به فرم Vaidya نوشته شده است و با انجام تبدیل $dv=dt+\frac{dr}{f}$ می توان آن را در مختصات کروی نوشت. آنتروپی افق‌های رویداد بیرونی و درونی برابر با $S_\pm=\pi r_\pm^2$ و دما بر روی افق ها به شکل زیر است

$$T_\pm=\pm\frac{Mr_\pm^6-q^2r_\pm^5-\ell^2(4M^2r_\pm^3+2Mq^2r_\pm^2-2q^2r_\pm)}{2\pi(r_\pm^4+q^2\ell^2+2m\ell^2r_\pm)}$$

در اینجا نیز شرط (4) برآورده نمی‌شود و جهان‌شمولی را نداریم.

5-3 سیاه‌چاله غیرتکین رایسنر-نوردستروم (RN)

در [17] با متصل نمودن یک ناحیه دوسیته به مرکز سیاه‌چاله RN، یک سیاه‌چاله غیرتکین با متریک زیر معرفی شده است

$$ds^2=-Bdt^2+Adr^2+r^2(d\theta^2+\sin^2\theta d\varphi^2), \tag{13}$$

برای از بین بردن تکینگی در $r=0$ کره‌ای پر از یک سیال کامل باردار به شعاع r_0 در مرکز سیاه‌چاله فرض شده است و با حل

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

معادلات حرکت کنش اینشتین-ماکسول، A و B به شکل زیر بدست می‌آید

$$B(r)=A^{-1}(r)=\begin{cases}1-\dfrac{r^2}{R^2}, & r\le r_0\\ 1-\dfrac{2m}{r}+\dfrac{q^2}{r^2}, & r\ge r_0\end{cases} \qquad (14)$$

بدست آمده اند. این جواب دارای چهار پارامتر m (جرم)، q (بار)، R (شعاع ناحیه دوسیته) و r_0 مشخص می‌شود. از (14) واضح است که در $r\ge r_0$ فضا-زمان با متریک RN توصیف می شود که افقهای رویداد آن در $r_\pm=m\pm\sqrt{m^2-q^2}$ است. در [17] با بررسی شرایط اتصال در r_0 نشان داده می شود که $r_0\le r_-$ و بنابراین افقهای رویداد جواب غیرتکین نیز با (15) داده می‌شود. ازطرفی آنتروپی افقها $S_\pm=\pi r_\pm^2$ است و بسادگی می‌توان دید که ویژگی جهانشمولی در اینجا برقرار است زیرا داریم

$$S_+S_-=\pi^2q^4 \qquad (15)$$

6-3 سیاه‌چاله‌های Fan-Wang

در [14] چند سیاه‌چاله غیرتکین برای گرانش اینشتین جفت شده با الکترودینامیک غیرخطی معرفی شده است که متریک آنها نیز به فرم (5) است. نشان داده شده است که برای دو مورد از این جوابها با توابع $f=1-\dfrac{2Mr^2}{r^2+q^2}$ و $f=1-\dfrac{2Mr^2}{(r+q)^2}$ رابطه جهانشمولی بازهم به شکل (15) برقرار است.

4-بحث و نتیجه‌گیری

در این پژوهش ضرب آنتروپی افق‌ها در تعدادی از سیاه‌چاله های غیرتکین را پیداکردیم. ما مشاهده نمودیم که ویژگی جهانشمولی برای برخی از آنها وجود دارد اما برای بعضی دیگر برقرار نیست و این شبیه وضعیتی است که در بقیه سیاه‌چاله ها (دارای تکینگی) با آن روبرو هستیم. درباره اینکه چرا جهانشمولی در برخی جوابها برقرار نیست می توان به دو مورد زیر اشاره کرد: 1) در [8و11] بحث شده است که درصورت برقرار بودن ویژگی جهانشمولی، بار مرکزی بخش چپگرد و راستگرد (c_L,c_R) نظریه میدان دوگان سیاه‌چاله باهم برابر است و می‌توان آنها را از رابطه زیر پیداکرد

$$c_L=c_R=\frac{6}{4\pi^2}\frac{\partial}{\partial N_i}(S_+S_-) \qquad (16)$$

که N_i بار کوانتیده جواب است واین روش، رهیافت ترمودینامیکی نام دارد. بنابراین می‌توان گفت که برای جوابهایی که جهانشمول نیستند داریم $c_L\neq c_R$. مورد مشابهی که در [8] مطالعه شده است، سیاه‌چاله‌ها در نظریه‌هایی هستند که کنش آنها جملات ناقض پاریته چرن-سایمونز دارد که باعث نابرابری c_L,c_R می‌گردد. این جوابها نیز جهانشمول نیستند. 2) مشاهده شده است که جهانشمولی یک ویژگی مربوط به جواب (و نه نظریه گرانش) است مثلا سیاه‌چاله‌های Kerr و Myers-Perry در 5 بعد که هردو جواب نظریه اینشتین هستند، جهانشمول می‌باشند اما جواب Myers-Perry در ابعاد بیش از 5 جهانشمول نیست.

تاجاییکه نویسندگان این گزارش می دانند، تابحال اثباتی برای چرایی وجود یا عدم وجود جهانشمولی در سیاه‌چاله‌ها انجام نشده و صرفا یک مشاهده است، اما مطالعه جهانشمولی دستکم یک مزیت مهم دارد: در مواردی که این ویژگی برقرار است، می توان بار مرکزی نظریه میدان دوگان سیاه‌چاله را به سادگی از S_+S_- پیداکرد. مثلا درجواب بخش (3-5) باتوجه به روابط (15) و (16) داریم $c_q=6q^3$. همین نتیجه را می‌توان از روش گروه تقارنهای مجانبی بدست آورد که به معنی درستی رهیافت ترمودینامیکی برای سیاه‌چاله‌های غیرتکین است.

مرجع‌ها

[1] A. Strominger and C. Vafa, *Phys. Lett. B* **379**, 99 (1996).
[2] G. T. Horowitz, J. M. Maldacena and A. Strominger, *Phys. Lett. B* **383**, 151 (1996).
[3] M. Cvetic and F. Larsen, Phys. Rev. D **56**, 4994 (1997) .
[4] M. Ansorg and J. Hennig, Phys. Rev. Lett. **102**, 221102 (2009).
[5] B. Chen, S. x. Liu and J. j. Zhang, JHEP **1211**, 017 (2012)
[6] H. Golchin, Phys. Rev. D **100**, 126016 (2019)
[7] H. Golchin, JHEP **127**, 03 (2020)
[8] Davood Mahdavian Yekta and Hanif Golchin, Eur.Phys.J.C **80** (2020) 5, 473
[9] A. Castro, N. Dehmami, G. Giribet and D. Kastor, JHEP 1307, 164 (2013)
[10] W. Xu, J. Wang and X. h. Meng, Phys. Lett. B 746, 53 (2015)
[11] B. Chen, Z. Xue and J. J. Zhang, JHEP 1303, 102 (2013)
[12] P. Pradhan, Gen. Rel. Grav. 48, no. 2, 19 (2016)
[13] Z.Y. Fan and X. Wang, Phys.Rev.D **94**, 124027 (2016)
[14] J.M. Bardeen, in Proceedings of International Conference GR5, Tbilisi, USSR (1968), p. 174
[15] C. Bambi and L. Modesto, Phys. Lett. B 721, 329-334 (2013)
[16] V.P. Frolov, Phys. Rev. D **94**, 104056 (2016)
[17] J. P. S. Lemos and V. T. Zanchin, Phys. Rev. D 83, 124005 (2011)

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی کرم چاله ها در گرانش تعمیم یافته *F(R,T)*

سید داود ساداتیان، پگاه مظفری

دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک، دانشگاه نیشابور

چکیده

در این مقاله، با استفاده از نظریه گرانش تعمیم یافته F(R,T) *، راه حلی برای وجود کرمچاله ها از نظر ریاضی و بدون نقض شرایط انرژی پیدا کرده ایم و نشان می دهیم نیازی نیست برای تعریف یک کرمچاله از ماده نامتعارف (exotic matter) استفاده کرد. در ادامه با تحلیل عددی، معادلات خود را مورد بررسی قرار داده و شرایط برقراری شرط انرژی ضعیف را مطالعه کرده ایم..*

Investigation of wormholes at modified gravity F(R,T)

S. Davood Sadatian and P. Mozafari
Department of Physics, Faculty of Basic Sciences,University of Neyshabur, Neyshabur, Iran

Abstract

In this paper, we find a solution to the existence of wormholes using generalized gravity theory F(R,T) *without violating energy conditions, and show that there is no need to use an exotic substance to define a wormhole. In the following, we have examined our equations by numerical analysis.*

PACS No.: 95.36.+x, 98.80.-k, 04.50.kd

۱- مقدمه

از زمان پیشنهاد نظری کرمچاله تا کنون تحقیقات زیادی در رابطه با آن انجام گرفته تا ما را به کرمچاله هایی با قابلیت سفر در زمان و مکان نزدیک کند. کرم چاله ها اولین بار در سال ۱۹۳۵ به عنوان خصوصیتی از هندسه شوارتزشیلد با نام پل ایشتین-روزن که دو جهان را به هم متصل می کنند، معرفی شدند و اهمیت آن ها زمانی مشخص شد که محققان متوجه شد که این پل ها می توانند دو منطقه با فاصله زیاد را که در جهان هستند به هم متصل کنند [1].
در طی تحقیقات و محاسبات ریاضی، نشان داده شده است که در نسبیت عام شاهد نقض شرایط انرژی نول در گلوی کرم چاله ها هستیم [2] ،موادی را که این شرایط را نقض می کنند را مواد نامتعارف می نامند که دارای چگالی انرژی منفی هستند وکرمچاله ها را تشکیل دادند [3] . بعضی از دانشمندان این انرژی منفی را با استفاده از فانتوم انرژی که شکلی فرضی از انرژی تاریک است توجیه می کنند و بعضی دیگر با استفاده از نظریه میدان های کوانتومی به بررسی آن می پردازند[2].
از طرفی پژوهش ها نشان داده است که اگر گرانش را در ابعاد بالاتر از سه بعد در نظر بگیریم می توانیم کرمچاله هایی با گلوی باریک و ماده عادی داشته باشیم[4].
یکی از نظریه هایی که به توصیف کرم چاله بدون مواد نامتعارف می پردازد نظریه F(R) است که در واقع یک تابع از اسکالر ریچی است [5]. با استفاده از محاسبات این نظریه می توان به این نتیجه رسید که چگالی انرژی در تمام چارچوب ها مثبت است [5] .
همچنین اگر فرض شود که ماده ی گذرنده از کرمچاله شرایط انرژی را نقض نمی کند، نگه دارنده ی هندسه کرمچاله ها، جملات مشتق بالاتر رویه می شوند [5] .
در همین راستا در این مقاله مدل گرانشی تعمیم یافته F(R,T) را مورد نظر برای مطالعه مطالب گفته شده در بالا انتخاب کرده ایم. در مدل F(R,T) یک تابع اسکالر R که اسکار ریچی

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

اضافه شده تا مدلی تعمیم یافته از گرانش را برای بررسی ویژگی ها و پارمتر های مختلف کیهان شناخت ایجاد گردد[6] . در ادامه بررسی خواهیم کرد که این مدل گرانش تعمیم یافته می تواند علاوه بر توصیف کرمچاله هایی بدون نیاز به ماده نامتعارف، به توجیه انبساط شتاب دار جهان بدون نیاز به تعریف ماده یا انرژی تاریک بپردازد.

بنابراین ساختار این مقاله به شرح ذیل نگاشته شده است. در بخش ۲ ابتدا مدل گرانش تعمیم یافته F(R,T) را به اختصار بررسی می کنیم. در بخش ۳ معادلات میدان مدل F(R,T) را برای بررسی کرمچاله ها بدست می آوریم و در نهایت در بخش ۴ با آنالیز عددی به تحلیل معادله حالت و جواب های کرم چاله ای این مدل می پردازیم.

۲- مدل گرانش F(R ,T)

نظریه گرانش F(R ,T) وابسته به دو میدان اسکالر R و T است که در آن میدان T با در نظر گرفتن اثر کوانتومی بدست آمده است[7] . این رابطه نشان دهنده جفت شدگی بین ماده و هندسه است، محققان با انتخاب شکل مناسب از عملگر F در این مدل معادله دینامیک مربوط به کیهان شناخت را حل می کنند[8] . در این مدل کنش برابر است با:

$$S = \int \left[\frac{f(R,T)}{16\pi} + \mathcal{L}_m\right]\sqrt{-g}d^4x \qquad (۱)$$

$F(R ,T)$ عملگر R,T است، L_m چگالی جرم لاگرانژی است و g درمینان ماتریسن متریک ، همچنین سیستم واحدی که دراینجا در نظر گرفته شده است برابر است با : c=1=G.

با داشتن چگالی جرم لاگرانژی می توان به جرم میدان در این مدل پی برد از آنجا که L_m= -p که p همان فشار کل است. در نتیجه تانسور انرژی و تکانه برابر می شود با :

$$T_{\mu\nu} = (\rho + p_t)u_\mu u_\nu + p_t g_{\mu\nu} + (p_r + p_t)\chi_\mu \chi_\nu \qquad (۲)$$

در اینجا ρ برابر است با چگالی جرم و انرژی ، P_r فشار شعاعی اندازه گیری شده در جهت x_m و P_l فشار اندازه گیری شده در جهت عمود بر x_m است. معادله میدان در این نظریه با وردش کنش نسبت به متریک به شکل زیر بدست می آید:

(۳)

$$f_R(R,T)R_{\mu\nu} - \frac{1}{2}f(R,T)g_{\mu\nu} + (g_{\mu\nu}\square - \nabla_\mu\nabla_\nu)f_R(R,T) = 8\pi T_{\mu\nu} + f_T(R,T)(T_{\mu\nu} + \mathcal{P}_{g_{\mu\nu}})$$

۳- تعیین معادلات میدان مدل F(R,T)

در ادامه برای بررسی کرمچاله ها از متریک شناخته شده موریس و تورن استفاده می کنیم[9]

$$ds^2 = -U(r)dt^2 + \frac{dr^2}{V(r)} + r^2 d\Omega^2 \qquad (۴)$$

که در ان U(r) تابع سرخ گرایی و b(r) تابع شکل کرمچاله و همچنین V(r)=1-b(r)/r و $d\Omega^2 = d\theta^2 + sin^2\theta d\phi^2$ می باشد. در محل گلوگاه کرمچاله باید رابطه زیر برقرار باشد :

$$b'(r_0) < 1.$$

می توان مولفه های غیر صفر تانسور های تکانه و انرژی را با استفاده از متریک موریس تورن و انتخاب $F(R,T) = R + 2\lambda T$ (در اینجا λ یک ثابت است) به شکل زیر بدست آورد :

$$\rho = \frac{b'(r)}{r^2(8\pi+2\lambda)} \qquad (۵)$$

$$P_r = -\frac{b(r)}{r^3(8\pi+2\lambda)} \qquad (۶)$$

$$P_l = \frac{b(r) - b'(r)r}{2r^3(8\pi + 2\lambda)} \qquad (۷)$$

که در اینجا ρچگالی انرژی ، P_rفشار شعاعی و P_l فشار عرضی است. با جایگذاری جواب های بالا در معادله حالت :

$$\rho_r = \omega P_l \qquad (۱۰)$$

روابط ذیل را بدست می آوریم :

$$\frac{b'(r)}{r^2(8\pi+2\lambda)} = \frac{\omega b(r) - r\omega b'(r)}{2r^3(8\pi+2\lambda)} \qquad (۱۱)$$

$$2rb'(r) = \omega b(r) - r\omega b'(r) \qquad (۱۲)$$

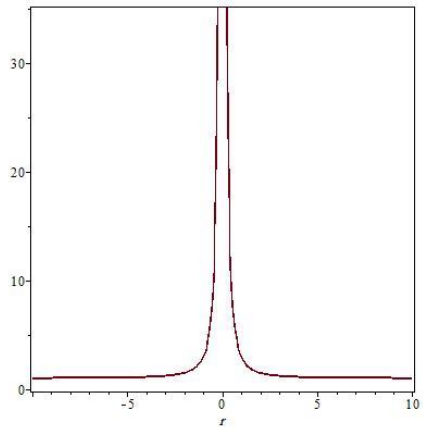
$$b'(r)(2r + r\omega) - \omega b(r) = 0 \qquad (۱۳)$$

$$b(r) = -r_0 r^{\frac{\omega}{\omega+2}} \qquad (۱۴)$$

در ادامه با استفاده از معادلات بالا به تحلیل معادله حالت و جواب های کرم چاله می پردازیم.

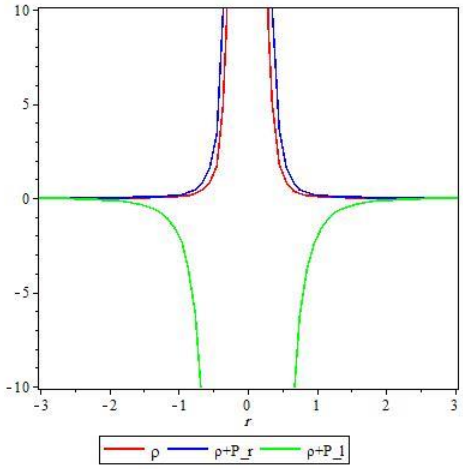
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

با انتخاب پارامترهای مناسب نمودار $1-\frac{b(r)}{r}$ بر حسب r را رسم می کنیم که در آن $r_0 = 2$ و $\omega = -1$ می باشد.



شکل ۱: نمودار $1-\frac{b(r)}{r}$بر حسب r برای $\omega = -1$ و $r_0 = 2$و $\lambda = 1$.

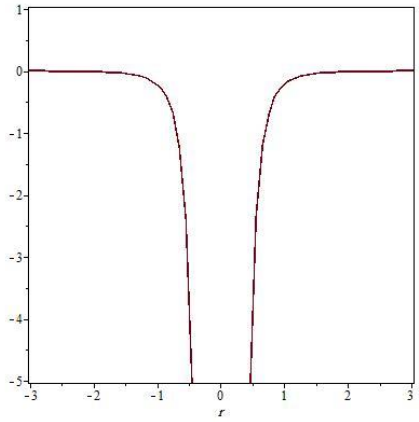
همچنان که در این نمودار مشخص است برای مقادیر منفی از r این نمودار صعودی و برای مقادیر مثبت r این نمودار نزولی می شود. در ادامه با استفاده از معادلات میدان شرایط انرژی ضعیف را بررسی می کنیم. بر این اساس در شکل (۲) نمودار های $\rho + P_l, \rho + P_r, \rho$ بر حسب r رسم شده است که در آن پارامترها را به صورت $r_0 = 2$ و $\omega = -1$ در نظر گرفته ایم.



شکل ۲: نمودار های $\rho + P_l, \rho + P_r, \rho$ بر حسب r، برای $\omega = -1$ و $r_0 = 2$ و $\lambda = 1$.

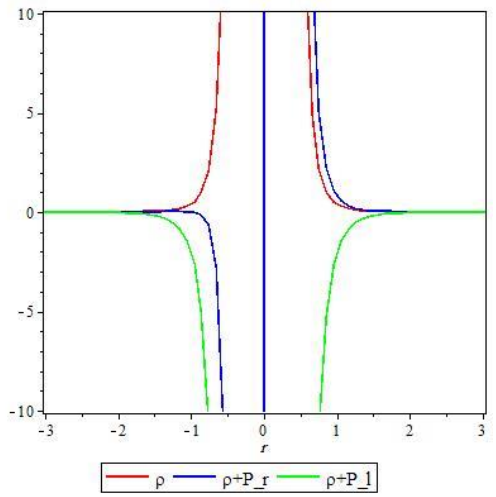
با توجه به مثبت بودن ρ و $\rho + P_r$شرایط انرژی ضعیف در تمام فضا برقرار است.

شکل (۳) نمودارρ بر حسب r را نشان می دهد با در نظر گرفتن پارامترهایی به صورت $r_0 = 2$ $\omega = -2$. در این حالت مشاهده با توجه به منفی بودن ρ شرایط انرژی ضعیف در تمام فضا نقض می شود.



شکل ۳: نمودار ρ برحسب r برای $\omega = -3$ و $r_0 = 2$و $\lambda = 1$

در شکل (۴) نمودار های ρ, ρ+P_r, ρ+P_l بر حسب r که پارامترها را به صورت $r_0 = 2$ و ω=-3 در نظر گرفته ایم را رسم کرده ایم. با توجه به مثبت بودن ρ شرایط انرژی ضعیف در تمام فضا برقرار است. ولی برای $\rho + P_r$ برای فقط r های مثبت نمودار این رابطه مثبت می شود و شرط انرژی ضعیف برقرار می گردد. برای r های منفی نمودار $\rho + P_r$ شرط انرژی ضعیف را نقض می کند، همچنین نمودار $\rho + P_l$ نیز شرایط انرژی ضعیف در تمام فضا را نقض می کند.



شکل ۴: نمودار های $\rho + P_l, \rho + P_r, \rho$ بر حسب r برای $\omega = -3$ و $r_0 = 2$ و $\lambda = -10$.

با توجه به شکل (۴) مشخص می شود هر چه ω و λ منفی تر شوند چگالی انرژی با سرعت کمتری افزایش می یابد ولی

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

همچنان مثبت باقی می ماند. همچنین ماده حمایت کنند در نزدیکی آن ماده معمولی می باشد.

۵- نتیجه گیری

در این پژوهش با استفاده از روابط مربوط به مدل گرانش تعمیم یافته F(R,T) جواب های کرم چاله ای را مورد محاسبه قرار دادیم. در ادامه شرایط انرژی ضعیف را برای شرایط خاصی از فضای پارامتری مدل مورد بررسی قرار گرفت. نشان داده شد که برخی از این جوابها شرایط انرژی ضعیف را در نزدیکی کرم چاله برقرار می کنند. البته در این مقاله اشاره شده است که با توجه به انتخاب ω های مناسب و همچنین تعیین پارامتر λ به شکل دقیق امکان برقراری شرایط انرژی در نزدیکی کرم چاله به وجود می آید و برخی از انتخاب ها بر روی فضای پارامتری منجر به نقض شرایط انرژی ضعیف می شود.

۶- مرجع ها:

[1] Panagiota Kanti, Burkhard Kleihaus and Jutta Kunz Phys. Rev. D **85**, 044007 ,(2012).
[2] Mohammad Reza Mehdizadeh and Amir Hadi Ziaie Phys. Rev. D **96**, 124017 ,(2017).
[3] Luis A. Anchordoqui, Santiago Perez Bergliaffa, and Diego F. Torres, Phys. Rev. D **55**, 5226, (1997).
[4] Martín G. Richarte and Claudio Simeon, Phys. Rev. D **77**, 089903, (2008)
[5] Francisco S. N. Lobo and Miguel A. Oliveira, Phys. Rev. D 80, 104012 (2009).
[6] P. H. R. S. Moraes and P. K. Sahoo, Phys. Rev. D 96, 044038 (2017).
[7] P.H.R.S. Moraes, R.A.C. Correa and R.V. Lobato, Analytical general solutions for static wormholes in f(R, T) gravity, JCAP07 (2017) 029 .
[8] Mubasher Jamil, D. Momeni, R. Myrzakulov, Chin. Phys. Lett. Vol. 29, No. 10 (2012) 109801.
[9] Emilio Elizalde and Martiros Khurshudyan, Phys. Rev. D 99, 024051 (2019).
[10] B. malekneghad, M. R. Mehdizadeh, wormhole solutions in einstein-gauss-bonnet gravity, Gravity and Cosmology Conference, Tehran, Iran (2020).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

محاسبه ی رسانش حرارتی $UO_{2-0.25}$ با حل معادله ی ترابرد بولتزمن

سمیرا شیخی، محمود پیامی شبستر، محمدرضا باسعادت

پژوهشکده فیزیک و شتابگرها، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، سازمان انرژی اتمی، تهران، ایران

چکیده

در این مطالعه اثر نقیصه های نقطه ای بر رسانش حرارتی دی اکسید اورانیوم بررسی شده است. به طور خاص اثر اکسیژن تهی جای مورد توجه بوده است. با حل معادله ی ترابرد فونون بولتزمن با استفاده از تقریب زمان واهلش رسانش حرارتی دی اکسید اورانیوم برای UO_2 و $UO_{2-0.25}$ به دست آمده است. نتایج نشان دادند که هرگونه تغییری در ساختار شبکه ی دی اکسید اورانیوم رسانش حرارتی را به طرز چشمگیری کاهش می دهد. رسانش حرارتی UO_2 با افزایش دما کاهش یافت ولی برای ساختار $UO_{2-0.25}$ رسانش حرارتی تقریبا مستقل از دما می باشد.

واژه های کلیدی: دی اکسید اورانیوم، معادله ی فونون بولتزمن، رسانش حرارتی، مسافت آزاد میانگین فونونی، نقیصه.

Study of Thermal Conductivity of $UO_{2-0.25}$ by Solving Phonon Boltzmann Equation

Sheykhi Samira, Payami Shabestar Mahmoud, Basaadat Mohammad Reza

Physics and Accelerators Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, Atomic Energy Organization of Iran, Northen Kargar St., Tehran

Abstract

In this study the effect of point defects on the thermal conductivity of UO_2 is investigated. Specially, Oxygen vacancy is considered. Thermal conductivity of UO_2 and $UO_{2-0.25}$ is calculated by solving phonon Boltzmann equation under the relaxation time approximation. The results show that any changes to the lattice structure of UO_2 reduce thermal conductivity significantly. The thermal conductivity of UO_2 decrease with increasing temperature but for the $UO_{2-0.25}$ the thermal conductivity is relatively independent of temperature.

***Keywords**: Uranium dioxide, Phonon Boltzmann equation, Thermal Conductivity, Phonon life time, Defect.*

PACS No. 71:73

مقدمه

سال هاست که دی اکسید اورانیوم متداول ترین سوخت راکتورهای هسته ای است .سوخت باید بتواند سالها در برابر آسیب های متنوع ناشی از تابش های مختلف کار کند. به دلیل نقش حیاتی سوخت در راکتور درک مکانیزم های حرارتی در سوخت از اهمیت ویژه ای برخوردار است. در این میان رسانش حرارتی کلیدی ترین پارامتر در تعیین توزیع دماست. به دلیل اینکه مطالعات آزمایشگاهی در این زمینه با محدودیت همراه است، مطالعات نظری از ارزش بالایی برخوردار هستند. دی اکسید اورانیوم تحت شرایط عملکردی راکتور و یا حتی بعد از ساخت اغلب به شکل $UO_{2\pm x}$ یافت می شود. نقیصه های نقطه ای در سوخت های اکسیدی اثرات مضری بر انتقال حرارت در سوخت های اکسیدی را دارا می باشند چون آن ها مد های ارتعاشی ساختارهای کریستالی را تغییر می دهند[۳،۲،۱]. در میان آن ها بین نشین های اکسیژن مهم ترین محصول فرعی چرخه سوخت هسته ای می باشد، از آنجایی که بین نشین های اکسیژن انرژی تشکیل منفی دارند سوخت های اکسیدی می توانند به راحتی اکسید شده و هایپراستوکیومتری شوند. اثر بین نشین های اکسیژن روی اکسیدهای اکتینیدی و فرایند پخش آن ها ، سالها از مهم ترین

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

موضوعات مطالعاتی مورد توجه بوده است. به طور ویژه خواص انتقال حرارت اکسیدهای اکتینیدی با نقیصه های مختلف بارها مورد مطالعه قرار گرفته است. برای مثال لوکاتا[1] و همکارانش[٤] پراکندگی نقیصه های نقطه ای از بین نشین های اکسیژن را در هایپراستوکیومتری SIMFUEL[2] بررسی کردند. پاکارینن[3] و همکارانش [٥] کاهش رسانش حرارتی UO_2 را تحت تابش یون He^{2+} گزارش کردند. اما بررسی اثرات بین نشین های اکسیژن بر رسانش حرارتی سوخت های اکتینیدی بسیار کم هستند. در سال ۲۰۰۹ واتانبل[4] و همکارانش [٦] رسانش حرارتی UO_2 با استوکیومتری-بالا و -پایین را با غلظت های متفاوتی از نقیصه های مختلف محاسبه نمودند. در سال ۲۰۲۰ میشل[5] و همکارانش[٧] رسانش حرارتی اکسیدهای اکتینیدی را با غلظت های متفاوت و با استفاده از روش دینامیک مولکولی غیرتعادلی محاسبه کردند.

ما در این کار اثر تهی جای و بین نشین اکسیژن را بر رسانش حرارتی UO_2 را با حل معادله ی ترابرد فونون بولتزمن و با تقریب زمان واهلش بررسی کردیم. بدین ترتیب که ابتدا رسانش حرارتی UO_2 خالص را محاسبه کرده و با داده های موجود مقایسه کردیم در ادامه رسانش حرارتی برای ساختار $UO_{2-0.25}$ جداگانه محاسبه و بررسی شد. در این مطالعه سعی شده است که با بررسی مسافت آزاد میانگین فونونی در هر مورد رسانش حرارتی بررسی شود.

مبانی نظری

رسانش حرارتی از حل معادله‌ی ترابرد بولتزمن به دست می‌آید. با حل این معادله، جمعیت مدها محاسبه می‌شود. تحت تقریب RTA فرض می‌شود که جمعیت از توزیع تعادلی ابتدایی اش پیروی می‌کند. فرض اصلی تقریب RTA این است که هم فرایندهای نرمال و هم فرایندهای اومکلپ فرایندهای مقاومتی هستند، در حالی که فرایندهای نرمال غیر مقاومتی هستند. در محاسباتی که فرایندهای نرمال مهم هستند (برای مثال در دماهای پایین و یا در مواد با رسانش حرارتی بالا)، این تقریب به رسانش حرارتی پایین تر منجر می‌شود. طبق قانون فوریه رسانش حرارتی، نسبت شارگرمایی Q در یک ماده به گرادیان دمایی ∇T،به شکل زیر تعریف می‌شود:

$$Q = -k\nabla T$$

رسانش حرارتی یک تانسور مرتبه دوم است که عناصر غیر قطری آن صفر است. در جامد کریستالی حامل های انتقال حرارت الکترون ها و فونون ها هستند که در این کار به دلیل عایق بودن UO_2 تمرکز ما بر روی فونون هاست. دینامیک حاکم بر فونون ها از معادله‌ی ترابرد فونون بولتزمن پیروی می‌کند. رسانش حرارتی از حل معادله‌ی خطی شده‌ی ترابرد فونون بولتزمن برای تابع توزیع فونون حالت پایا f_λ به دست می‌آید:

$$\nabla T.v_\lambda \frac{\partial f_\lambda}{\partial T} = \frac{\partial f_\lambda}{\partial t}|_{\text{scattering}}$$

به گونه‌ای که طرف چپ معادله متناظر با پخش فونونی ناشی از گرادیان دمایی است و طرف راست نرخ تغییر تابع توزیع فونونی ناشی از فرایندهای پراکندگی مجاز است. در اینجا v_λ سرعت گروه فونون در مد $\lambda \equiv (q,s)$ و q و s به ترتیب شاخص شاخه‌ی فونونی و بردار موج در فضای معکوس هستند) است. در معادله‌ی BTE خطی شده، توزیع f_λ ، تابع توزیع بوز-اینشتین $f_\lambda^0 = 1/(\exp(\beta\hbar\omega_\lambda) - 1)$است به اضافه‌ی یک جمله که به طور خطی با ∇T متناسب می‌باشد.

نتایج محاسبات و بحث

طبق بررسی های آزمایشگاهی بلور دی اکسید اورانیوم یک عایق مات است که در دمای زیر ۳۰ کلوین خاصیت پادفرومغناطیسی غیرهم خط دارد و در دماهای بالاتر یک پارامغناطیس است.

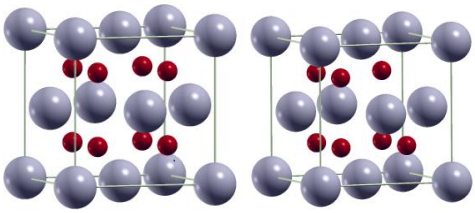
---

[1] Lucuta
[2] Simulated Spent Nuclear Fuel
[3] Pakarinen
[4] Watanable
[5] Mitchell

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

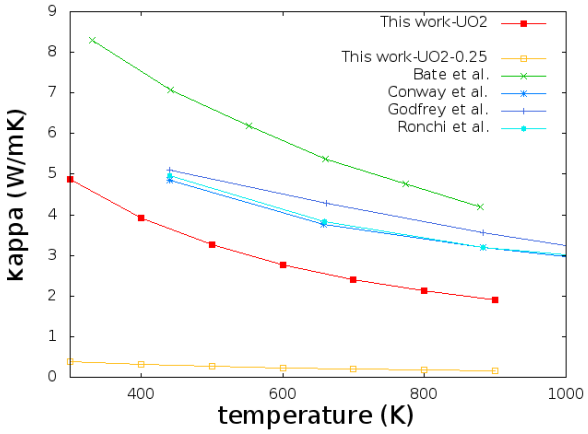
ساختار کپه‌ای این بلور خالص متعلق به گروه فضایی ۲۲۵و فلوئوریت با ثابت شبکه‌ی a=b=c= ۵/۴۷ آنگستروم می‌باشد[۸].

در کارهای پیشین ما رسانش حرارتی دی اکسید اورانیوم را ، با مدلسازی حالت پارامغناطیس توسط محاسبات غیر–اسپین–قطبیده، و صرفنظر کردن از اعمال تصحیح هابارد و با حل معادله ی BTE به دست آوردیم [۹،۱۰،۱۱]. در این پژوهش رسانش حرارتی بلور دی اکسید اورانیوم را با در نظر گرفتن حالت اسپینی پادفرومغناطیس با درجه ی k ۱ و همچنین با احتساب تقریب هابارد و با حل معادله ی BTE به دست آوردیم. این محاسبات شامل سه قسمت است: اول: بهینه کردن کامل ساختار و به دست آوردن ثابت های تعادلی بهینه، دوم: محاسبه‌ی ثابت های نیروی مرتبه دوم و سوم، سوم: به کار بردن ثابت های نیرو برای محاسبه‌ی خواص فونونی و سپس رسانش حرارتی. برای انجام محاسبات در این پژوهش از دو بسته ی نرم افزاریGULP [۱۲] و ALAMODE [۱۳] استفاده شده است. GULP بر اساس روش های میدان نیرو[۶] محاسبات را انجام می دهد و بسته نرم افزاری ALAMODE برای تحلیل رسانش حرارتی طراحی شده است. در هر مرحله بهینه سازی ساختار و محاسبه ی نیروها در ساختارهای با اتم های جا به جا شده با استفاده از کد GULP و محاسبه ی ثابت های نیرو و در نتیجه رسانش حرارتی با استفاده از کد ALAMODE انجام شده است.



شکل ۱. ساختار کریستال a) UO_2 خالص، b) $UO_{2-0.25}$

سلول واحد UO_2 استوکیومتری و $UO_{2-0.25}$ غیراستوکیومتری در شکل ۱ نشان داده شده اند. درهر سه محاسبه از سوپرسل ۲×۲×۲ استفاده شده است. هر ساختار به ترتیب حاوی ۹۶ اتم و ۸۸ اتم می باشند. در هر مرحله ساختار ابتدا بهینه شده و ثابت های تعادلی محاسبه شده اند. سپس با استفاده از روش جا به جایی محدود ثابت های نیروی مرتبه دوم و سوم محاسبه گردیدند. بدین منظور مقدار جا به جایی برای محاسبه ی ثابت نیروی مرتبه دوم برابر ۰/۰۱ آنگستروم بود و همچنین هیچ شعاع قطعی برای محاسبه ی نیروی وارد بر اتم ها در نظر گرفته نشد بدین معنی که تمام جا به جایی های ممکن به حساب آورده شدند. تعداد ساختارهای با اتم های جا به جا شده برای محاسبه ی ثابت نیروی مرتبه دوم به ترتیب برای ساختار ۹۶ اتمی برابر ۲ ساختار و برای ساختار ۸۸ اتمی برای ۷ ساختار بود که نیروی وارد بر اتم های آن ها محاسبه شد و ثابت های نیروی مرتبه ی دوم به دست آمد. برای محاسبه ی ثابت نیروی مرتبه سوم مشابه کاری که برای ثابت نیروی مرتبه ی دوم انجام شد را تکرار کردیم با این تفاوت که مقدار جا به جایی برابر ۰/۰۳ آنگستروم را در نظر گرفتیم و مجددا هیچ شعاع قطعی در نظر گرفته نشد. تعداد ساختارهای با اتم های جا به جا شده به ترتیب برای ساختار ۹۶ اتمی برابر ۱۶۵ ساختار و برای ساختار ۸۸ اتمی برابر ۸۶۵ ساختار بود که نیروی وارد بر اتم های آن ها محاسبه شد و ثابت های نیروی مرتبه ی سوم و در نتیجه رسانش حرارتی به دست آمد.



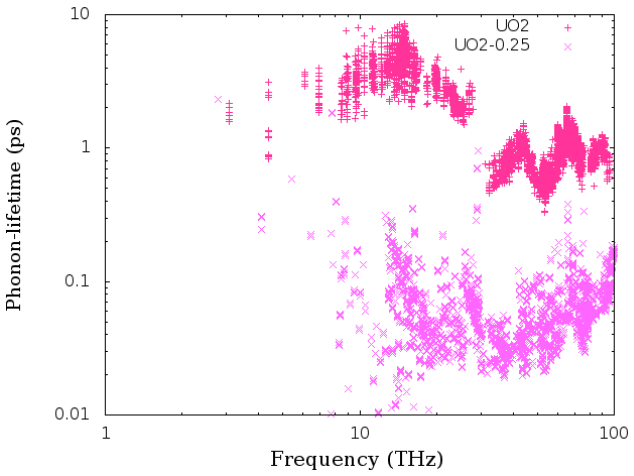
شکل ۲ . رسانش حرارتی بر حسب دما محاسبه شده با تقریب RTA برای ساختارهای UO_2 و $UO_{2-0.25}$ و مقایسه ی آن ها با داده های تجربی[۱۴،۱۵،۱۶،۱۷].

لازم به ذکر است که در مرحله مقادیر جا به جایی بر اساس تست همگرایی انتخاب شده اند. رسانش حرارتی محاسبه شده از روش RTA بر حسب دما در شکل ۲ با مقادیر تجربی مقایسه شده است. همانطوری که از شکل ۲ دیده می شود نمودار رسانش حرارتی بلور دی اکسید اورانیوم خالص، چنانچه انتظار داشتیم،

[۶] Force-field method

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

پایین تر از مقادیر تجربی می باشد که ناشی از استفاده از تقریب RTA است. رسانش حرارتی UO_2 با افزایش دما روند کاهشی دارد. در شکل ۳ مسافت آزاد میانگین فونونی بر حسب فرکانس برای هر دو ساختارUO_2 و $UO_{2-0.25}$ در دمای ۳۰۰ کلوین رسم شده است. همانطوری که در شکل ۳ دیده می شود، مسافت آزاد میانگین فونونی در ساختار $UO_{2-0.25}$ پایین تر از بلور خالص است، نقیصه در ساختار سبب می شود که مسافت آزاد میانگین پایین تر (پراکندگی فونونی بالاتر) و بنابراین باعث پایین تر آمدن رسانش حرارتی می شود . رسانش حرارتی این ساختار تقریبا از دما مستقل شده است و افت وخیز زیادی در هیچ دمایی دیده نمی شود (شکل۲) .



شکل ۳. مسافت آزاد میانگین محاسبه شده بر حسب فرکانس براس ساختار های برای ساختارهای UO_2 و $UO_{2-0.25}$ در مای ۳۰۰ درجه کلوین.

نتیجه گیری

در این پژوهش رسانش حرارتی کریستال UO_2 و $UO_{2-0.25}$ را با حل معادله ی ترابرد فونون–بولتزمن و با استفاده از تقریب زمان واهلش به دست آوردیم. ثابت های نیروی مرتبه ی دوم و سوم با استفاده از روش جا به جایی محدود محاسبه شدند. همانگونه که مشاهده شد هر تغییری در ساختار دی اکسید اورانیوم خالص باعث میشود که رسانش حرارتی به طرز چشمگیری کاهش یابد. پایین تر بودن رسانش حرارتی خالص در مقایسه با مقادیر تجربی نیز به دلیل استفاده از تقریب RTA بود. رسانش حرارتی UO_2 با افزایش دما روند کاهشی داشت در حالی که رسانش حرارتی $UO_{2-0.25}$ افت و خیز ناچیزی با دما داشت.

مرجع‌ها

[1] Resnick, A.; Mitchell, K.; Park, J.; Farfán, E.B.; Yee, T. Thermal transport study in actinide oxides with point defects. *Nucl. Eng. Technol.* **2019**, *51*, 1398–1405.
[2] . Park, J.; Farfán, E.B.; Mitchell, K.; Resnick, A.; Enriquez, C.; Yee, T. Sensitivity of thermal transport in thorium dioxide to defects. *J. Nucl. Mater.* **2018**, *504*, 198–205.
[3] Park, J.; Farfán, E.B.; Enriquez, C. Thermal transport in thorium dioxide. *Nucl. Eng. Technol.* **2018**, *50*, 731–737.
[4]. Lucuta, P.; Matzke, H.; Verrall, R. Thermal conductivity of hyperstoichiometric SIMFUEL. *J. Nucl. Mater.* **1995**, *223*, 51–60.
[5] Pakarinen, J.; Khafizov, M.; He, L.; Wetteland, C.; Gan, J.; Nelson, A.T.; Hurley, D.H.; El-Azab, A.; Allen, T.R. Microstructure changes and thermal conductivity reduction in UO2 following 3.9 MeV He2+ ion irradiation. *J. Nucl. Mater.* **2014**, *454*, 283–289.
[6] Watanabe, T.; Srivilliputhur, S.G.; Schelling, P.K.; Tulenko, J.S.; Sinnott, S.B.; Phillpot, S.R. Thermal Transport in Off-Stoichiometric Uranium Dioxide by Atomic Level Simulation. *J. Am. Ceram. Soc.* **2009**, *92*, 850–856.
[7] Mitchell, K.; Park, J.; Resnic, A.; Horner, H.; Farfan, E. B.,Phonon scattering and thermal conductivity of actinide oxides with defects. *Appl. Sci.* **2020**, *10*, 1860; doi:10.3390/app10051860
[8]M. Idiri, T. Le Bihan, S. Heathman, J. Rebizant, Behavior of actinide dioxides under pressure: Uo2 and tho2, Physical Review B 70 (1) (2004)014113.
[۹] سمیرا شیخی، محمود پیامی، *مجله ی پژوهش فیزیک ایران*، **جلد 20** شماره 1 سال 1399 صفحه 65-72.
[10] S. Sheykhi, M. Payami, *Iran J Sci Technol Trans* **44** (2020) 1585-1593
[11] S. Sheykhi, M. Payami, Physica C: Superconductivity and its Applications 549 (2018)93-94.
[12] J. D. Gale, A. L. Rohl, *Mol. Simul.* **29** (2003) 291.
[13] T.Tadano, Y.Goha, and S. Tsuneyuki, *J. Phys.: Condens. Matter* **26** (2014)225402.
[14]] J. B. Conway, R. M. Fincel, and R. A. Hein, Trans. Am. Nucl. Soc. 6 (1963) 1553.
[15]C. Ronchi, M. Sheindlin, M. Musella and G. J. Hyland, J. App. Phys. 85 (1999) 776
[16]J. L. Bates, C. E. McNeilly, J. J. Rasmussen, Matter.Sci. Res. 5(1971) 11.
[17] T. Godfrey, W. Fulkerson, T. Kollie, J. Moore, D. McElroy, J. of the American Ceramic Society 48 (6) (1965) 297-305.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی تغییرات آنتالپی و تکانه مغناطیسی بر حسب فشار در ترکیب $CaMnO_3$ در مقایسه با ترکیب $SrMnO_3$

ساکی، نرگس[۱]؛ اعظمی، آزاده[۱*]

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

چکیده

در این تحقیق خواص ساختاری، الکترونیکی، مغناطیسی و الکتریکی ترکیب $SrMnO_3$ و $CaMnO_3$ با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن مبتنی بر نظریه تابعی چگالی و کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو بررسی شده است. برای هر دو ترکیب، پارامتر هابارد برای اتم منگنز با استفاده از روش پاسخ خطی و تقریب $LDA+U$ محاسبه شده است. پارامتر هابارد $3/5$ eV و $3/1$ eV به ترتیب برای ترکیب $CaMnO_3$ و $SrMnO_3$ به دست آمد. نتایج محاسبات نشان داد که هر دو ترکیب مواد پاد فرومغناطیسی عایق و نوع G هستند و گاف انرژی $0/075$ eV و $0/25$ eV به ترتیب برای ترکیب $SrMnO_3$ و $CaMnO_3$ محاسبه شد. هر دو ترکیب دارای ساختار پروسکایت مکعبی هستند که در آن اتم منگنز در مرکز یک هشت ضلعی قرار دارد که توسط اتم های اکسیژن احاطه شده است و رئوس مکعب محل اتم های Sr و Ca است. اثر فشار بر این دو ترکیب از ۵ تا ۲۰ درصد در جهت کشش (TS) و فشاری (PS) در امتداد محور z بررسی شده است و گذار فاز HS[۱] به LS[۲] هر دو ترکیب از طریق نتایج محاسبات آنتالپی مشاهده شد. نتایج نشان داد که که در فشارهای بالاتر و پایین تر از -10 GPa و -20 GPa ، هر دو ترکیب به ترتیب در حالت HS و LS پایدار هستند. علاوه بر این، گشتاور مغناطیسی $CaMnO_3$ در فشار $-20/51$ GPa از $3/41$ μ_B در حالت HS به $1/44$ μ_B در حالت LS و گشتاور مغناطیسی $SrMnO_3$ در فشار $-26/87$ GPa از $4/37$ μ_B در حالت HS به $1/55$ μ_B در حالت LS کاهش می‌یابد.

Investigation of enthalpy and magnetic momentum changes of pressure in $CaMnO_3$ compared to $SrMnO_3$

Saki, Narges[1], Aezami, Azadeh [1*]

*[*1] Departments of Physics, Ahvaz Branch, Islamic Azad University, Ahvaz, Iran*

Abstract

In this research, structural, electronic, magnetic and electrical properties of $SrMnO_3$ and $CaMnO_3$ have been investigated using calculations based on density-functional theory from scratch and Quantum-Espresso calculation code. For both compounds, Hubbard parameter has been calculated for Mn atom using a linear response approach and LDA+U approximation. This parameter is 3.5 eV for $CaMnO_3$ and it is 3.1 eV for $SrMnO_3$. The results of the calculations showed that despite the fact that both compounds are insulator and G-type antiferromagnetic materials, the gap energy of $SrMnO_3$ is 0.075 eV and that of $CaMnO_3$ is 0.25 eV. Both samples have cubic perovskite structure in which Mn atom are located at the center of an octagon surrounded by oxygen atoms and vertices of cube is the place for Sr and Ca atoms. The effect of pressure on these two compounds have been studied from %5 to %20 in tensile (TP) and compressive (CP) direction along z axis and the transition from HS to LS of both compounds have been searched through the results of enthalpy calculations in terms of pressure. Results reveal that in pressures higher and lower than -10 GPa and -20 GPa, both materials are in stable HS and LS state, respectively. Moreover, the magnetic moment of $CaMnO_3$ in the pressure of -20.51 GPa decreases from 3.41μ_B in stable HS state to 1.44 μ_B in LS state and that of $SrMnO_3$ in the pressure of -26.87 GPa declines from 4.37 μ_B in HS state to 1.55 μ_B in LS state.

[۱] High Spin
[۲] Low Spin

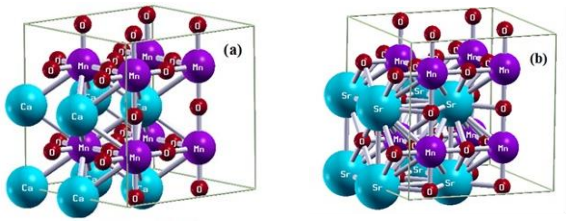
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مقدمه

منگنایت های پروسکایتی با فرمول شیمیایی عمومی $A_{1-x}B_xMnO_3$ هستند که در آن A یک یا چند عنصر سه ظرفیتی مانند La، Y، Pr، Nd و B یک یا چند عنصر دو ظرفیتی مانند Sr، Ca، Ba و یا یک عنصر یک ظرفیتی مثل Ag، K و Na است[۱]. ترکیبات پروسکایت می تواند در هریک از ساختارهای بلوری مکعبی، تک میل، چهارگوشی، راستگوشی و لوزی رخ شکل گیرند. ترکیب $CaMnO_3$ یکی از گونه های اکسیدهای پروسکایت و ترکیب پایه برای بسیاری ازمنگنایتهای چند ظرفیتی است. این ترکیب با ساختارهای پروسکایت مکعبی با گروه فضایی pm3m، اکتاهدرال با گروه فضایی pbnm و ارتورومبیک با گروه فضایی pnma ،عایق پادفرومغناطیس نوع G است، که در دمای ۱۲۰ کلوین به فاز پارامغناطیس گذار می کند [۲] این ترکیبات به دلیل داشتن رسانندگی الکتریکی بالا، واکنش پذیری الکتروکاتالیستی وپایداری در دمای بالا به عنوان الکترود در محیط های اکسید کننده، ساخت سلولهای سوختی اکسید جامد به کار میروند [۳]. افزون بر این، این ترکیب به عنوان ماده ترموالکتریک اکسیدی نوع p که در ژنراتورها به کار میروند، بسیار مورد توجه هستند[٤]. ترکیب $SrMnO_3$ نمونه کمیاب (نادر) از یک ترکیب که دارای هرسه مورفولوژی پروسکایت مکعبی در دمای بالا با گروه فضایی $Pm\bar{3}m$ ، هگزاگونال با گروه فضایی p63/mmc و دردمای کمتر از ۱۰۰کلوین تقارن ترکیب کمتر شده و به ساختار اورترومبیک با گروه فضایی pnma تبدیل می شود[۵]. محاسبات ابتدا به ساکن ساختار مکعبی این ترکیب نشان می دهد که این ترکیب نیز دارای نظم پادفرومغناطیس نوع G است و در دمای صفر کلوین عایق با گاف کوچکی می باشد[٦].

روش انجام محاسبات

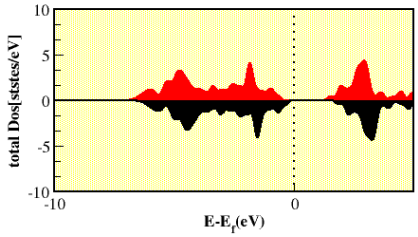
در این تحقیق محاسبات با استفاده از روش امواج تخت با شبه پتانسیل فوق نرم در چارچوب نظریه ی تابعی چگالی با نرم افزار کوانتوم اسپرسو [۷] وتقریب LDA+U انجام شده است. برای محاسبه پتانسیل تبادلی- همبستگی در تقریب چگالی موضعی هابارد (LDA+U) با استفاده از روش پاسخ خطی، پارامتر هابارد برای اتم Mn ۳/۵ eV و ۳/۱ eV به ترتیب *برای ترکیب* $CaMnO_3$ و $SrMnO_3$ *به دست آوردیم*. ثابت های شبکه به دست آمده در این محاسبات $\mathring{A}$ ۳/۸۲۳ و $\mathring{A}$ ۳/۸۱۰ به ترتیب برای $SrMnO_3$ و $CaMnO_3$ است که با نتایج تجربی مطابقت خوبی دارد. انرژی قطع بهینه شده Ry ۵۰ و Ry ٦۰ به ترتیب برای $SrMnO_3$ و $CaMnO_3$ و همچنین به منظور هموار کردن رفتار سیستم استفاده از تابع پهن شدگی (mp) در بازه ی پهن شدگی ۰/۰۰۵ تا ۰/۰۱۵ انتخاب مناسبی برای هر دو ترکیب می باشد. تعداد نقاط فضای k برای منطقه اول بریلوئن با یک توزیع ٦×٦×٦ را برای هر دو ترکیب استفاده کرده‌ایم. دقت محاسبات انرژی کل 10^{-10} Ry استفاده شده است. به صورت شماتیک ساختارهای بلوری $SrMnO_3$ و $CaMnO_3$ را در شکل ۱ نشان داده ایم.



شکل۱: (a) بطور شماتیک شبکه بلوری ترکیب $CaMnO_3$ و (b) شبکه بلوری ترکیب$SrMnO_3$ را نشان می دهد.

بحث و نتایج

پس از انجام بهینه سازی پارامترهای اولیه، به محاسبهٔ چگالی حالت پایه ترکیب $CaMnO_3$ و$SrMnO_3$ پرداختیم.

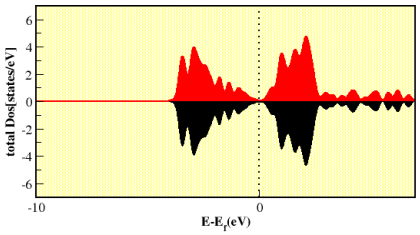


شکل۲: نمودار چگالی حالت کلی ترکیب $CaMnO_3$ را نشان می دهد.

نتایج محاسبات در شکل ۲ و ۳ نشان می دهد که ترکیب $CaMnO_3$ و $SrMnO_3$ در حالت پایه دارای ساختار پروسکایت

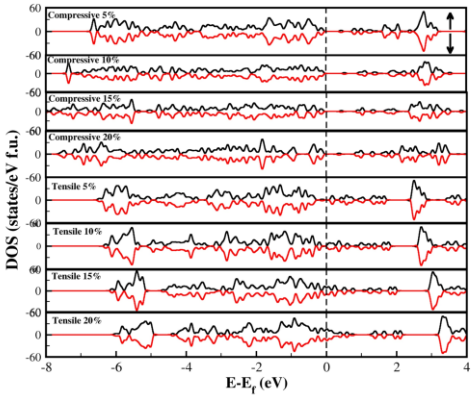
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مکعبی با خاصیت مغناطیسی پاد فرومغناطیس و از نظر الکتریکی عایق است. گاف انرژی محاسبه شده مقدار ۰/۲۵ eV و ۰/۰۷۵ eV را برای ترکیب $CaMnO_3$ و $SrMnO_3$ به ترتیب نشان می دهد.



شکل۳: نمودار چگالی حالت کلی ترکیب $SrMnO_3$ را نشان می دهد.

پس از اعمال فشار کششی[۳] و فشاری[٤] از ۵ درصد تا ۲۰ درصد در راستای محور z مجدد محاسبات چگالی حالات را برای هر دو ترکیب انجام دادیم و نتایج تغییرات پیکربندی مغناطیسی و الکتریکی ترکیب $CaMnO_3$ و $SrMnO_3$ در شکل ٤ و ۵ ملاحظه می شود.



شکل٤: تغییرات چگالی حالات کل بر حسب تغییر فشار برای ترکیب $CaMnO_3$ را نشان می دهد.

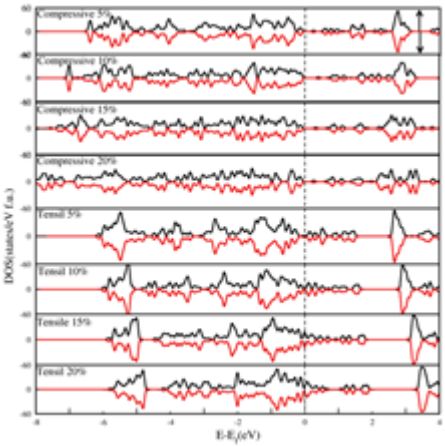
در هر دو ترکیب با اعمال فشار کششی و فشاری از ۵ تا ۲۰ درصد، با افزایش فشار مثبت (فشاری) فقط شدت قله ها تغییر کرده است اما از نظر الکتریکی هر دو ترکیب همچنان عایق باقی می مانند. با این حال، با افزایش فشار منفی (کششی) از فشار ۱۰ درصد، گاف انرژی تغییر کرده و تراز فرمی چگالی حالات را در هر دو کانال اسپینی بالا و پایین قطع می کند و هردو ترکیب از نظر الکتریکی شبیه یک فلز رفتار می کند. نتایج محاسبات نشان می دهد که با افزایش فشار به دلیل همپوشانی بیشتر توابع موج، هیبریداسیون پیوندها افزایش یافته و در نتیجه چگالی حالات گسترش می یابد. جدول ۱ تغییرات نظم الکتریکی ایجاد شده را بر حسب فشار محاسبه شده با واحد گیگاپاسکال نشان می دهد.

جدول۱:تأثیر فشار مثبت (فشاری) و فشار منفی(کششی) بر خواص الکتریکی

فشار مثبت	$CaMnO_3$ (GPa)		$SrMnO_3$ (GPa)		فشار منفی	$CaMnO_3$ (GPa)		$SrMnO_3$ (GPa)	
۵٪	۳۸/۸۱	عایق	٦٤/۱۸	عایق	-۵٪	-۱۰/۸٤	عایق	-۱۸/۱۸	عایق
۱۰٪	٦۲/۱۱	عایق	۵۰/۳۵	عایق	-۱۰٪	-۱۷/۳٤	فلز	-۲۰/۱۹	عایق
۱۵٪	۱۱۷/٤۲	عایق	۸۹/۵۳	عایق	-۱۵٪	-۱۸/۲٦	فلز	-۲۱/٦۳	فلز
۲۰٪	۱٤۸/۰۱	عایق	۱۲٤/۰٤	عایق	-۲۰٪	-۲٦/۰۲	فلز	-۲۳/۲۹	فلز

دو ترکیب $CaMnO_3$ و $SrMnO_3$ را نشان می دهد.

از سوی دیگر همانطور که نتایج محاسبات نشان می دهد با افزایش فشار مثبت (فشاری) در ترکیب $CaMnO_3$ طول پیوند Mn-O از $\mathring{A}$ ۱/۸۸۵۳ به $\mathring{A}$ ۱/۵۰۸۲ کاهش یافته و پتانسیل دافعه تشکیل می شود و با افزایش فشار در جهت مخالف، طول پیوند به $\mathring{A}$ ۲/۲٦۲٤ افزایش می یابد. نتایج محاسبات مشابه برای ترکیب $SrMnO_3$ نیز نشان می دهد که افزایش فشار در جهت مثبت (فشاری)، طول پیوند Mn-O از $\mathring{A}$ ۱/۹۱۱۵ به $\mathring{A}$ ۱/٦۸۲۱ کاهش یافته و افزایش فشار در جهت منفی (کششی) طول پیوند را به $\mathring{A}$ ۲/۳۷۰۳ افزایش داده است.



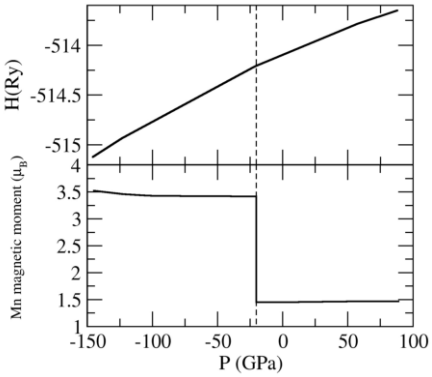
شکل۵: تغییرات چگالی حالات کل بر حسب تغییر فشار برای ترکیب $SrMnO_3$ را نشان می دهد.

به منظور یافتن گذار احتمالی اسپینی از حالت HS به LS آنتالپی را برای فشارهای مختلف اعمال شده بر هر دو ترکیب $CaMnO_3$

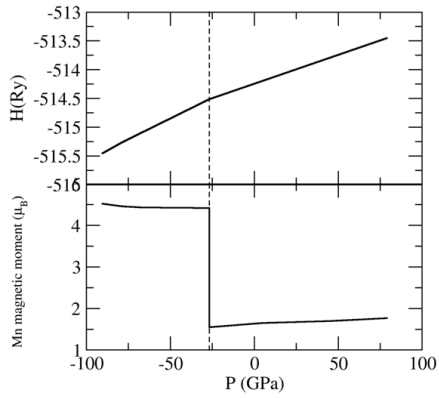
[۳] Tensile Pressure (TP)
[٤] Compressive Pressure (CP)

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

و $SrMnO_3$ محاسبه کردیم. نتایج نشان داد که درترکیب $CaMnO_3$ در فشار حدود ۲۰/۵۱ GPa- و در ترکیب$SrMnO_3$ در فشار ۲۶/۸۷ GPa- یک گذار HS به LS دیده می شود. همچنین در نمودار ٦ و ۷ گشتاور مغناطیسی اتم منگنز در هر دو تر کیب را بر حسب فشار رسم کردیم که نشان می دهد که گشتاور مغناطیسی هر دو ترکیب با افزایش فشار به آرامی کاهش می یابد. در ترکیب $CaMnO_3$ در فشار ۲۰/۵۱ GPa- افت قابل توجهی در گشتاور مغناطیسی مشاهده می شود که مقدار آن از ۳/٤۱ μ_B در حالت HS به ۱/٤٤ μ_B در حالت LS کاهش می یابد و در ترکیب $SrMnO_3$ گشتاور مغناطیسی از ٤/۳۷ μ_B در حالت HS به ۱/۵۵ μ_B در حالت LS کاهش می یابد.



شکل٦: نمودار تغییرات آنتالپی و گشتاور مغناطیسی اتم منگنز را بر حسب فشار در ترکیب $CaMnO_3$ نشان می دهد.



شکل۷: نمودار تغییرات آنتالپی و گشتاور مغناطیسی اتم منگنز را بر حسب فشار در ترکیب $SrMnO_3$ نشان می دهد.

نتیجه گیری

خواص ساختاری، مغناطیسی و الکتریکی $SrMnO_3$ و $CaMnO_3$ را با استفاده از محاسبات مبتنی بر نظریه چگالی و کد محاسباتی کوانتوم-اسپرسو بررسی کردیم. برای هر دو ترکیب، پارامتر هابارد برای اتم منگنز با استفاده از روش پاسخ خطی و تقریب LDA+U محاسبه شده است. پارامتر هابارد را برای اتم منگنز ۳/۵ eV و ۳/۱eV به ترتیب در ترکیب$CaMnO_3$ و $SrMnO_3$ بدست آوردیم. نتایج محاسبات نشان داد که علیرغم اینکه هر دو ترکیب مواد پاد فرومغناطیس نوع G و عایق هستند، اما گاف انرژی eV ۰/۰۷۵ برای $SrMnO_3$و eV ۰/۲۵ برای $CaMnO_3$ بدست آمد. اثر فشار بر این دو ترکیب از ۵ تا ۲۰ درصد در جهت فشار منفی (کششی) و فشار مثبت (فشاری) در امتداد محور z بررسی شده است و گذار HS به LS هر دو ترکیب از طریق نتایج محاسبات دیده می شود. نتایج محاسبات آنتالپی بر حسب فشار نشان می دهد که در فشارهای بالاتر و پایین تر ازGPa ۱۰- وGPa ۲۰- ، هر دو ماده به ترتیب در حالت HS و LS پایدار هستند. علاوه بر این، گشتاور مغناطیسی $CaMnO_3$ در فشارGPa ۲۰/۵۱- از ۳/٤۱ μ_B در حالت HS پایدار به ۱/٤٤ μ_B در حالت LS کاهش می‌یابد و گشتاور مغناطیسی $SrMnO_3$ در فشار GPa ۲٦/۸۷- از ٤/۳۷ μ_B در حالت HS به ۱/۵۵ μ_B در حالت LS کاهش می‌یابد.

مرجع‌ها

[۱]A. Kumar, M. Kumar, R. P. Singh, P. K. Singh.,"Opto-electronic, magnetic, thermodynamic and thermoelectric properties of cubic perovskite $SrMnO_3$: A first principle based spin polarized calculation" Solid. State. Commun. 324 (2021) 114139.

[۲] I. G. de Muro, M. Insausti, L. Lezama, and T. Rojo, "Morphological and magnetic study of CaMnO3− x oxides obtained from different routes," *Journal of Solid State Chemistry*, 178 (2005) 928-936.

[۳] S. Bošković, J. Dukić, B. Matović, L. Živković, M. Vlajić, and V. Krstić, "Nanopowders properties and sintering of CaMnO3 solid solutions," *Journal of Alloys and Compounds*, 463 (2008) 282-287.

[٤] J. Park, D. Kwak, S. Yoon, and S. Choi, "Thermoelectric properties of Bi, Nb co-substituted CaMnO3 at high temperature," *Journal of Alloys and Compounds*, 487 (2009) 550-555

[۵] R. Sondena; S. Stolen and P. Ravindran; "Corner-versus face-sharing octahedral in $AMnO_3$ perovskites (A=Ca, Sr, and Ba)"; *physical Review B* 75 (2007) 184105-184114.

[٦] R. Sondena; P. Ravindran; S. Stolen; T. Grande and M. Hanfland; "Electronic structure and magnetic properties of cubic and hexazgonal $SrMnO_3$ "; *physical Review B* 74 (2006) 144102-144113.

[۷] P. Giannozzi, S.Baroni, et al, Matteo Calandra; "QUANTUM ESPRESSO: a Modular and OpenSource Software Project for Quantum Simulations of Materials"; Journal of Physical Condens. Matter 21, (2009).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بهینه‌سازی ابعاد نانوحلقه‌های نیکلی با کاربرد حسگری

پورشریف ، اکرم[۱] ؛ رئیسی، شایسته [۲] ؛ صاحب سرا، پیمان[۲]

[۱] دانشکده مواد، گروه نانومواد دانشگاه صنعتی اصفهان

[۲] گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان

چکیده

در حسگرهای پلاسمونیک، اختلاف پاسخ های پلاسمونیکی در محیط‌های با ضریب شکست متفاوت باعث حسگری می‌شود. پاسخ‌های پلاسمونیک که می تواند بازتابش، میزان خاموشی و یا جذب نور تابشی باشد، وابسته به شکل، اندازه ساختار و جنس زیر لایه می‌باشد. ایجاد نانوآرایه و جنس زیرلایه می‌تواند خواص پلاسمونیک موادی با خواص ضعیف پلاسمونیک را تقویت نماید. مقاله پیش رو، خواص پلاسمونیک نانوآرایه‌های حلقوی نیکل را بر روی زیر لایه ITO به روش FDTD محاسبه شده است. این بررسی‌ها با تغییر در پارامترهای ساختاری از جمله فاصله نانوآرایه‌ها و ارتفاع نانوحلقه‌ها انجام می‌شود. نانوحلقه‌های ایجاد شده با روش‌های قابل دسترس مانند لیتوگرافی کلوئیدی می‌تواند دارای شعاع داخلی و خارجی در حدود ۲۰۰ و ۳۰۰ نانومتر به ترتیب باشد، که پیشنهاد می‌شود این نانوحلقه‌ها برای داشتن ضریب شایستگی و حساسیت بهینه در طول موج‌های مرئی دارای فاصله دیوار به دیوار ۶۰۰ نانومتر و ارتفاع ۱۵ نانومتر باشند.

واژه های کلیدی: نانوحلقه، حسگر، ضریب شکست، پلاسمونیک

Optimization of Nickel nanoring dimentions for sensing applications

Poursharif, Akram[1]; Raeesi Shayeste[2]; Sahebsara, Peyman[2]

[1] *Department of Material Engineering, Nanomaterial Group, Isfahan University of Technology, Isfahan, Iran*
[2] *Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan, Iran*

Abstract

The difference in plasmonic responses in various environments with different refractive indices is the base of sensing, in plasmonic sensors. Plasmonic responses, which can be reflection, extinction or absorption of radiant light, depend on the shape, size of the structure and the material of the substrate. Nanoarrays and substrates are usually used to enhance the plasmonic properties of materials. In the present paper we calculate the plasmonic properties of nickel nanoring arrays on the ITO substrate by FDTD method. This study is performed by changing the structural parameters such as the distance of the nano-arrays and the height of the nano-rings. Nanorings, created by available methods such as colloidal lithography, can take internal and external radii about 200 and 300 nm, respectively. It is suggested that these nanoring have a wall-to-wall distance of 600 nm and a height of 15 nm for optimum coefficient of sensitivity and figure of merit (FOM) at visible wavelengths.

Keywords: *plasmonic, nanosensor, sensivity, nanoring, figure of merit.*

PACS No. *70 , 78*

مقدمه

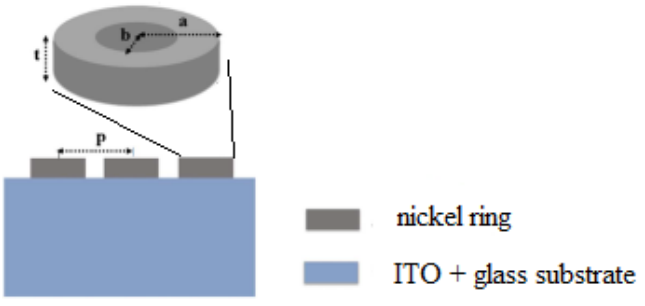
در حسگرهای پلاسمونیک از فرایند انتقال طیف‌های پلاسمونی در محیط‌هایی با ضریب شکست‌های مختلف استفاده می‌شود تا به عنوان یک مبدل برای سیگنال‌های حسگری عمل کند. حسگرهای پلاسمونیک می تواند شامل حسگرهای کلوئیدی و لایه نازک باشد که با حسگری نانوآرایه ها مزیت های هر دو گروه قابل جمع است. علاوه بر آن با رویکرد نانوآرایه ای امکان ارتقای خواص پلاسمونیک وجود دارد. به طوری که طبق گزارش انجام

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

شده اثرات پلاسمونیک در ساختارهای منظم نانوقرص‌های نیکلی در مقایسه با لایه نازک آن بر روی زیرلایه ITO دیده شده است[۱]. علاوه بر آن به منظور افزایش اثر حسگری میتوان از اثرات مگنتوپلاسمونیکی نیکل بهره برد [۲]. در برخی مطالعات نیز از اثر مگنتوپلاسمونیکی نیکل با فلزات نجیب با هم بهره برده شده است [۳]. در مقاله پیش رو اثرات پلاسمونیکی آرایه‌های نانوحلقوی و یا به عبارتی نانولوله های نیکی بر روی ITO به روش FDTD محاسبه شده است. این کار در ادامه بهینه‌سازی ابعاد نانومیله‌ها و یا نانوقرص‌های نیکلی است که قبلاً به آن پرداخته شده است [٤].

روش‌های محاسباتی

برای دستیابی به یک حسگر خوب، طراحی باید به گونه‌ای باشد که حساسیت حسگر بالا باشد. حساسیت به صورت تغییرات طول موج تشدید با تغییر در ضرایب شکست تعریف می شود. به منظور دستیابی به ساختاری با ابعاد بهینه ابتدا یک نانوحلقه طراحی می‌کنیم که در شکل زیر نشان داده شده است و شامل پارامترهای شعاع درونی ، شعاع بیرونی، عرض نانوحلقه، ضخامت آن و دوره تناوب آن از یک مرکز تا مرکز دیگر است که در شکل ۱ نشان داده شده است. ساختار به این صورت است که ابتدا یک زیرلایه شیشه ای با ضخامت ۱ میلی متر قرار داده شده است، سپس یک پوشش ITO بر روی آن قرار داده شده است. پس از آن چیدمانی از نانوحلقه های متناوب را می‌بینید که در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱: شماتیک سه بعدی نانوحلقه و دید جانبی از آرایه های نانوحلقه‌ای نیکل.

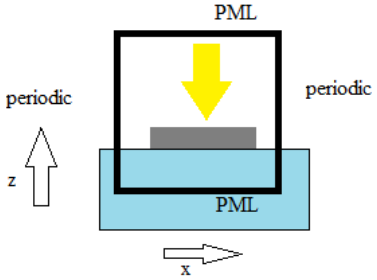
پارامترهای ساختاری حسگرهای پیشنهادی در شکل ۱ و جدول ۱ نشان داده شده است. شعاع درونی و بیرونی برای همه موارد به ترتیب ۲۰۰ و ۳۰۰ نانومتر در نظر گرفته شده‌است. این مقادیر با روش لیتوگرافی کلوئیدی قابل دستیابی است.

جدول۱ : پارامترهای ساختاری نانوحلقه‌های پیشنهادی جهت حسگری.

ردیف	شعاع داخلی (b)	شعاع خارجی (a)	فاصله مراکز دو حلقه مجاور(p)	ارتفاع(t)
۱	۲۰۰	۳۰۰	٦۰۰	۳۰
۲	۲۰۰	۳۰۰	۱۲۰۰	۳۰
۳	۲۰۰	۳۰۰	۱۲۰۰	٦۰
٤	۲۰۰	۳۰۰	۱۲۰۰	۱۰۰
٥	۲۰۰	۳۰۰	۱۲۰۰	۱٥

خواص نوری ساختار پیشنهاد شده به وسیله شبیه‌سازی عددی FDTD بررسی می شود. این روش به صورت عددی معادلات کرل ماکسول وابسته به زمان را حل میکند.

الگوریتم FDTD میدان های الکتریکی و مغناطیسی هر نقطه را در فواصل زمانی کوتاه محاسبه می کند. به منظور شبیه‌سازی ساختار نور در حسگرهای پیشنهادی با یک منبع صفحه موجی با مغناطیس عرضی(TM) از بالا به ساختار وارد می‌شود. نانوحلقه‌ها در راستای x و y به صورت متناوب ادامه می یابد و در راستای z با شرایط مرزی PML لایه مرزی کاملاً همسان قرار داده شده است(شکل۲). این شرایط به کاهش زمان شبیه‌سازی کمک می کند. همچنین یک مانیتور قدرت و میدان حوزه فرکانسی با هندسه مناسب برای استخراج ویژگی های نوری به کار برده می شود.



شکل ۲: نمای جانبی از شبیه‌سازی یک نانوحلقه.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

طبق رابطه زیر میزان جذب ضریبی از مقدار موهومی تابع دیلاریزاسیون می باشد:

$$\sigma_{abs} = k\,\mathrm{Im}(\alpha) \qquad (۱)$$

و این تابع برای یک نانوحلقه با توجه به ابعادش از رابطه زیر به دست می‌آید [٦]:

$$\alpha_X = 4\pi/3t(a-b)\frac{\epsilon_m(\omega)-\varepsilon_d}{\varepsilon_d+L_x(\varepsilon_d(\omega)-\varepsilon_d)} \qquad (۲)$$

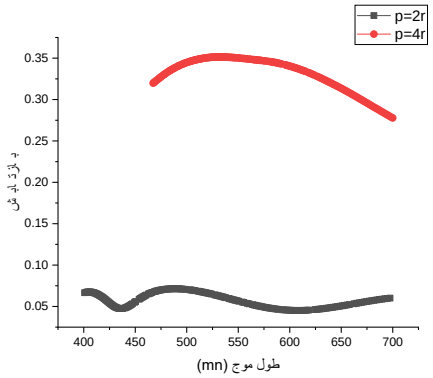
این رابطه وابستگی به پارامترهای ساختاری را نشان می‌دهد.

حسگری در سه محیط آزمایشی به ترتیب آب با ضریب شکست ۱,۳ و مخلوط آب و گلیسرول با ضریب شکست ۱,٤۱ و گلیسرول با ضریب شکست ۱,٤۷ انجام شده است.

نتایج

اثر فاصله و تناوب بین دو نانوحلقه و اثر ارتفاع

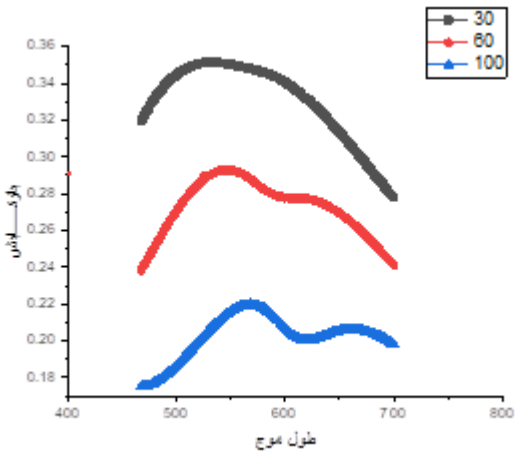
فاصله بین دو نانوحلقه اثر بسیار مهمی در طول موج تشدیدی دارد. این مقایسه در این جا بین دو حالت وقتی فاصله دیوار به دیوار صفر و وقتی این فاصله دو برابر شعاع نانو حلقه است بررسی شده است:



شکل۳: بازتابش مربوط به آرایه‌های نانوحلقوی نمونه‌های ۱و ۲ در محیطی با ضریب شکست n=۱ با فاصله مراکز نانوحلقه‌های مجاور با مقدار ٦۰۰ نانومتر (سیاه) و ۱۲۰۰ نانومتر(قرمز).

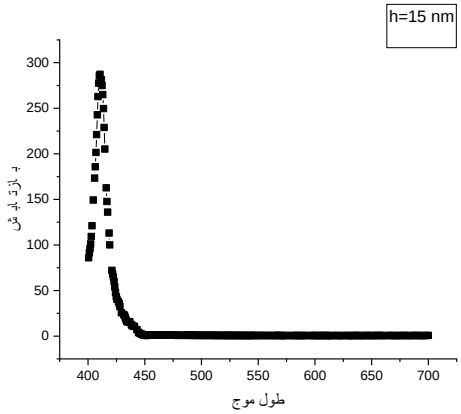
این کار در محیطی با ضریب شکست n=۱ انجام شده است. هر چند در هر دو مورد قله‌های پهنی مشاهده می‌گردد، اما میزان بازتابش در مورد نمونه‌ای با فاصله دو برابر شعاع مشهودتر است.

اثر ارتفاع در مقادیر ۳۰ نانومتر ، ٦۰ نانومتر و ۱۰۰ نانومتر بررسی شده است و نتیجه آن در شکل ٤ قابل مشاهده است. نتایج نشان می‌دهد که طبق نمودار در ارتفاع‌های کمتر میزان بازتابش بیشتر است. این کار در نانوآرایه‌هایی با ارتفاع ۱۵ نانومتر هم انجام شده است و نتایج بسیار متفاوت‌تری (شکل ۵) حاصل گشته است.



شکل ٤: بازتابش مربوط به آرایه‌های نانوحلقوی نمونه‌های ۲ و ۳ و ٤ در ارتفاع های ۳۰، ٦۰ و ۱۰۰ نانومتر، شعاع درونی ۲۰۰ نانومتر، شعاع بیرونی ۳۰۰ نانومتر.

این تفاوت رفتاری در نمونه های با ارتفاع کمتر از ۱۵ نانومتر احتمالا ناشی از اختلاف بسیار زیاد در ضریب شکست است، این ثابت‌ها برای مقادیر بالای ۱۵ نانومتر تمایل به سمت مقادیر ثابت مواد حجمی دارند [۵].



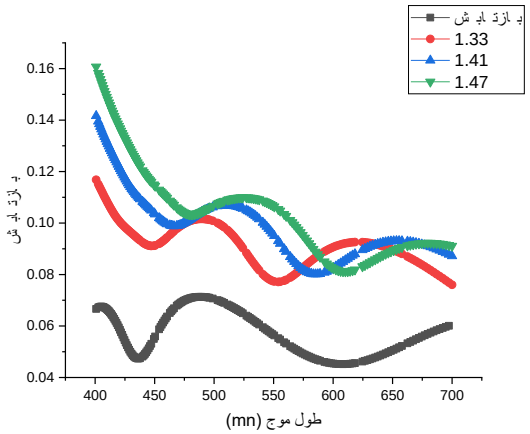
شکل۵: بازتابش مربوط به آرایه‌های نانوحلقوی؛ به ترتیب فاصله مرکز تا مرکز ۱۲۰۰ ، شعاع درونی ۲۰۰، شعاع بیرونی ۳۰۰، و ارتفاع ۱۵ (به واحد نانومتر).

حسگری

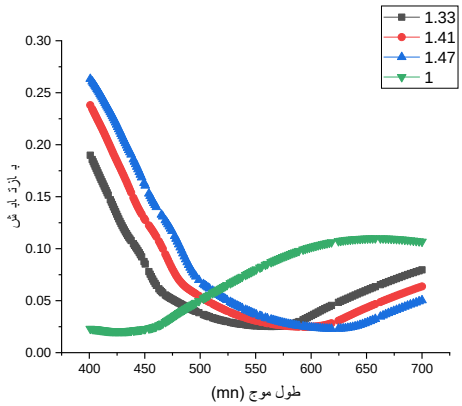
میزان حساسیت در حسگری به وسیله انجام FDTD در محیط‌های آزمایشی آب، مخلوط آب و گلیسرول، و گلیسرول به تنهایی با ضرایب شکست ۱,۳۳، ۱,٤۱ و ۱,٤۷ به ترتیب انجام می‌گیرد. این

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

کار ابتدا در نمونه های ۱ و ۲ انجام شده است (شکل ٦ و ۷) و بار دیگر به صورت ایده‌آل، در نمونه‌ای با ارتفاع ۱۵ نانومتر انجام گرفته است (شکل ۸).

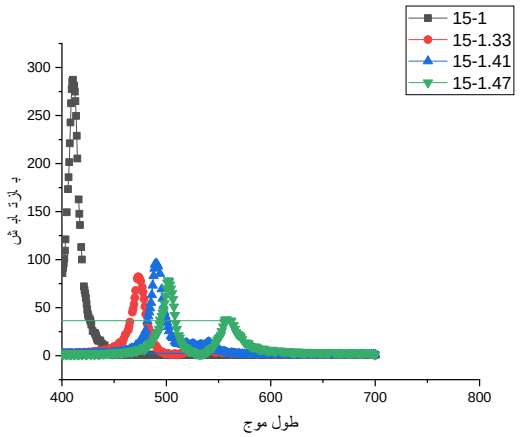


شکل ٦: بازتابش مربوط به آرایه‌های حلقوی نمونه ۱ در محیط‌هایی با ضریب شکست های ۱، ۱,۳۳، ۱,٤۱، و ۱,٤۷.



شکل ۷: بازتابش مربوط به آرایه‌های حلقوی نمونه ۲ در محیط‌هایی با ضریب شکست های ۱، ۱,۳۳، ۱,٤۱، و ۱,٤۷.

میزان حساسیت با استفاده از رابطه $S = \Delta\lambda/\Delta n$ در شکل ٦، ۷ و ۸ قابل مقایسه است.که در هر سه مورد تقریباً یکسان و برابر با $S = \Delta\lambda/\Delta n = ۷۱٤,۲۹$ می‌باشد. که در مقایسه با حسگرهای دیگر مقدار ممتازی است. اما تفاوت مشهود شکل‌های ٦ و ۷ با شکل ۸ در میزان ضریب شایستگی FOM آن‌هاست که کمیت مهمی در حسگری قلمداد می‌شود و از رابطه $FOM = \Delta S/FWHM$ محاسبه می‌گردد. FWHM پهنای قله در نصف ارتفاع است که هر چه قله تیزتر باشد این مقدار کمتر و ضریب شایستگی بهتر خواهد بود.



شکل۸: بازتابش مربوط به نمونه ۵ در محیط‌هایی با ضرایب شکست ۱، ۱,۳۳، ۱,٤۱، و ۱,٤۷.

نتیجه‌گیری

همان‌گونه که در بخش قبلی دیده شد فاصله بین دو نانوآرایه و ارتفاع آنها در میزان بازتابش مؤثر می‌باشد. رفتار پلاسمونیک نانوآرایه‌های حلقوی نیکلی در ارتفاع ۱۵ نانومتر بسیار مطلوب و حتی قابل رقابت با نانوآرایه‌های طلا می‌باشد. هر چند در صورت اعمال میدان مغناطیسی و استفاده از خواص مگنتوپلاسمونیک این فلز می‌توان حساسیت و ضریب شایستگی قابل ملاحظه ای حتی در ارتفاع‌های بالاتر به دست آورد که در ادامه کار می‌توان به آن پرداخت.

مرجع‌ها

[۱] M. Jung, o-W. Choi, Comparative study on plasmonic properties of a Ni film and 2D Ni nanodot array fabricated on an ITO substrate, *Materials Letters* **204**, No. 1 (2017) 49-52.

[۲] Kataja, V. Surface lattice resonances and magneto-optical response in magnetic nanoparticle arrays, *Nature Communications* **8**, (2015) 1-8.

[۳] Kataja, M. Hybrid plasmonic lattices with tunable magneto-optical activity, *Optics Express* 24, No. 4 (2016) 3652-3662.

[٤] پورشریف، اکرم و رئیسی، شایسته و صاحب‌سرا، پیمان ؛ « بهینه‌سازی ابعاد نانوسیم‌های نیکل و مس با کاربرد حسگری »؛ *کنفرانس فیزیک محاسباتی ایران*، زمستان ۱٤۰۰، صفحه ۱٤٦ تا ۱٤۹.

[۵] E. Dumont and etall, Optical properties of nickel thin films deposited by electroless plating, Thin Solid Films **301**, (1997) 149–153.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مدل‌سازی استفاده از $Zn_xCd_{1-x}S_ySe_{1-y}$ به عنوان لایه انتقال دهنده الکترون در سلول‌های خورشیدی $Sb_2(S,e_x)_3$

سعادت، محسن[۱]؛ سعادت، مرضیه[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان

[۲] دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان

چکیده

ساختار سلول خورشیدی $Sb2(S,Se)_3$ به صورت طلا/الکترود/ETL (CdS)/Sb2(S,Se)3/HTL (spiro-OMeTAD) در نظرگرفته شده است. در ابتدا یک مدل بر اساس داده‌های تجربی ساخته شد. لایه انتقال الکترون رایج CdS با $Zn_xCd_{1-x}S_ySe_{1-y}$ جایگزین شد. تغییرات نوارهای انرژی $Zn_xCd_{1-x}S_ySe_{1-y}$ به صورت تابعی از تغییر نسبت $x=Zn/(Cd+Zn)$ و $y=S/(S+Se)$ مورد مطالعه قرار گرفت. اثر تغییر نسبت $x=Zn/(Cd+Zn)$ و $y=S/(S+Se)$ در لایه $Zn_xCd_{1-x}S_ySe_{1-y}$ بر عملکرد سلول تحقیق شده است.

واژه های کلیدی: *سلول‌های خورشیدی $Sb_2(S,e_x)_3$، لایه انتقال الکترون، $Zn_xCd_{1-x}S_ySe_{1-y}$، خمیدگی نوار رسانش*

A modeling study on utilizing $Zn_xCd_{1-x}S_ySe_{1-y}$ as the electron transport layer of $Sb_2(S,e_x)_3$ solar cells

Saadat, Mohsen[1]; Saadat, Marzieh[2]

[1] Department of Physics, University of Sistan and Baluchestan, Zahedan
[2] Shahid Bahonar University of Kerman, Kerman

Abstract

$Sb_2(S,e_x)_3$ solar cells with FTO/ETL(CdS)/$Sb_2(Se_{1-x}S_x)_3$/HTL(spiro-OMeTAD)/Au structure is considered. Firstly, an initial model was designed based on $Sb_2(Se_{1-x}S_x)_3$ experimental data. The conventional CdS electron transport layer was replaced by $Zn_xCd_{1-x}S_ySe_{1-y}$ layer. The variation in energy band of $Zn_xCd_{1-x}S_ySe_{1-y}$ as a function of x=Zn/(Cd+Zn) and y=S/(S+Se) fraction were studied. the influence of x=Zn/(Cd+Zn) and y=S/(S+Se) ratio in the $Zn_xCd_{1-x}S_ySe_{1-y}$ layer on the performance of the solar cell were investigated.

***Keywords**: $Sb_2(S,e_x)_3$ solar cells, Electron transport layer, $Zn_xCd_{1-x}S_ySe_{1-y}$, Conduction band offset*

PACS No. 89

مقدمه

در سالهای اخیر سلول‌های خورشیدی لایه نازک غیرآلی مورد توجه زیادی قرار گرفته‌اند. از بین آنها سلول های خورشیدی CdTe و $Cu(In,Ga)Se_2$ به بازدهی های بالای ۲۲ درصد در مقیاس آزمایشگاهی رسیده‌اند، اما سمی بودن Cd و کمیاب بودن عناصری مانند In، Ge و Te مانعی بر سر راه تولید انبوه این سلول‌ها به شمار می‌رود. علاوه بر این‌ها، مواد جاذب دیگری از جمله پروسکایت، $Cu_2ZnSn(S,Se)_4$ ، Sb_2Se_3، Sb_2S_3 و $CuSb(S,Se)_2$ به دلیل داشتن خصوصیاتی از جمله سازگاری با محیط زیست، فراوانی مواد اولیه و روش‌های ساخت آسان در دست تحقیق و بررسی هستند [۱].

اخیرا کلکوژن های آنتیموان که پایداری بالایی دارند و عناصر آن

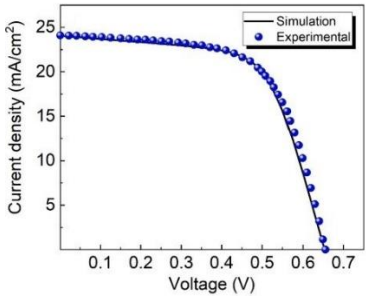
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

به فراوانی در دسترس هستند، به عنوان یک لایه جاذب نور دوستدار محیط زیست در سلول‌های خورشیدی لایه نازک مطرح شده‌اند. خانواده‌ی کلکوژن‌های آنتیموان با فرمول شیمیایی Sb_2X_3 شامل Sb_2S_3، Sb_2Se_3 و کلکوژن ترکیبی $Sb_2(S_{1-x},Se_x)_3$ می‌شود [۲]. در سال‌های اخیر سلول‌های خورشیدی بر پایه Sb_2X_3 پیشرفت قابل ملاحظه‌ای داشته‌اند و بازدهی آنها از مقدار اولیه کمتر از یک درصد به رکورد ۱۰/۵٪ رسیده است. بالاترین بازدهی گزارش شده برای سلول های خورشیدی حساس شده و تخت بر پایه Sb_2S_3 به ترتیب برابر ۷/۵٪ و ۷/۱٪ است و بهترین بازدهی برای سلول‌های خورشیدی حساس شده و تخت بر پایه Sb_2Se_3 به ترتیب ۳/۲۱٪ و ۹/۲٪ گزارش شده است. در مورد $Sb_2(S_{1-x},Se_x)_3$ سلول های حساس شده و تخت به ترتیب به رکورد بازدهی ۶/۶٪ و ۱۰/۵٪ رسیده‌اند. اما به هرحال بالاترین بازدهی به دست آمده یعنی ۱۰/۵٪ خیلی از مقدار پیش‌بینی تئوری شاکلی-کوییسر یعنی ۳۱٪ برای $Sb_2(S,Se)_3$ با گاف انرژی ۱/۵۲ eV کمتر است [۲]. بنابراین، تحقیقات تجربی و تئوری بیشتری در انتخاب و بهینه‌سازی مواد و ساختار مورد نیاز است.

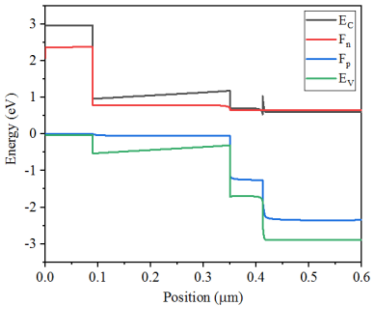
انتقال موثر الکترون و حفره های تولید شده در لایه جاذب به طرف الکترودها یکی از فاکتورهای چالشی و تعیین کننده در بهبود عملکرد در سلول خورشیدی است. انتقال الکترون و حفره‌های تولید شده توسط نور در لایه جاذب به سمت الکترودهای مربوطه به ترتیب توسط لایه انتقال الکترون[۱] (ETL) و لایه انتقال حفره[۲] (HTL) انجام می شود و بنابراین انتخاب درست این لایه ها اهمیت اساسی در عملکرد سلول دارد [۱]. تا کنون ETLهای مختلفی شامل TiO_2، CdS، ZnO و SnO_2 و HTLهای متفاوتی شامل P3HT، CZ-TA، PCPDTBT، PAN، CuSCN، Spiro-OMeTAD، CuI، Cu_2O، WO_{3-x} و V_2O_5 در سلول های خورشیدی مورد استفاده قرار گرفته‌اند [۳]. مطالعه انتقال حامل های بار به صورت تجربی کار شواری است زیرا هم اندازه‌گیری با روش‌های رایج کار سختی است و هم خواص مواد مختلف استفاده شده در سلول بر انتقال حامل های بار تاثیرگذار است. در این مطالعه ساختار سلول به صورت الکترود/ETL/$Sb_2(S,Se)_3$/HTL/الکترود در نظر گرفته شده است و $Zn_xCd_{1-x}S_ySe_{1-y}$ به عنوان ETL پیشنهاد شده است و اثر تغییر نسبت x=Zn/(Cd+Zn) و y=S/(S+Se) در آن بر عملکرد سلول مورد بررسی قرار گرفته است.

مدل

ساختار سلول خوشیدی مورد استفاده در این مطالعه یک پیوند نامتجانس تخت n-i-p به صورت الکترود/ETL ($Zn_xCd_{1-x}S_ySe_{1-y}$)/$Sb_2(S,Se)_3$/HTL/الکترود است که با استفاده از نرم‌افزار SCAPS شبیه سازی عددی شد. در این نرم‌افزار اساس محاسبات بر حل عددی معادلات پواسون و معادلات پیوستگی الکترون و حفره است. برای تمام شبیه‌سازی‌ها از طیف خورشید استاندارد AM ۱/۵ استفاده شد و عملکرد سلول در دمای ۳۰۰ کلوین ارزیابی شد. در ابتدا با تغییر پارامترهای مختلف سعی کردیم که مدلی ارائه کنیم که با نتایج تجربی همخوانی داشته باشد. شکل ۱ مقایسه بین نتایج تجربی [۴] و نتایج حاصل از مدل اولیه برای سلول خورشیدی که در آن CdS به عنوان ETL استفاده شده است، را نشان می‌دهد. همخوانی خوب بین نتایج بین نتایج تجربی و شبیه سازی به مدل اولیه ما اعتبار می‌دهد.



شکل ۱: مقایسه بین نتایج تجربی و شبیه‌سازی شده



شکل۲: نمودار نوار انرژی سلول خورشیدی مدل اولیه

[۱] electron transport layer

[۲] hole transport layer

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

شکل ۲ نمودار نواری سلول خورشیدی شبیه‌سازی شده را نشان می دهد. از شکل مشخص است که خمیدگی نوار رسانش در فصل مشترک لایه جاذب منفی و مقدار آن ۰/۴۹ eV است.

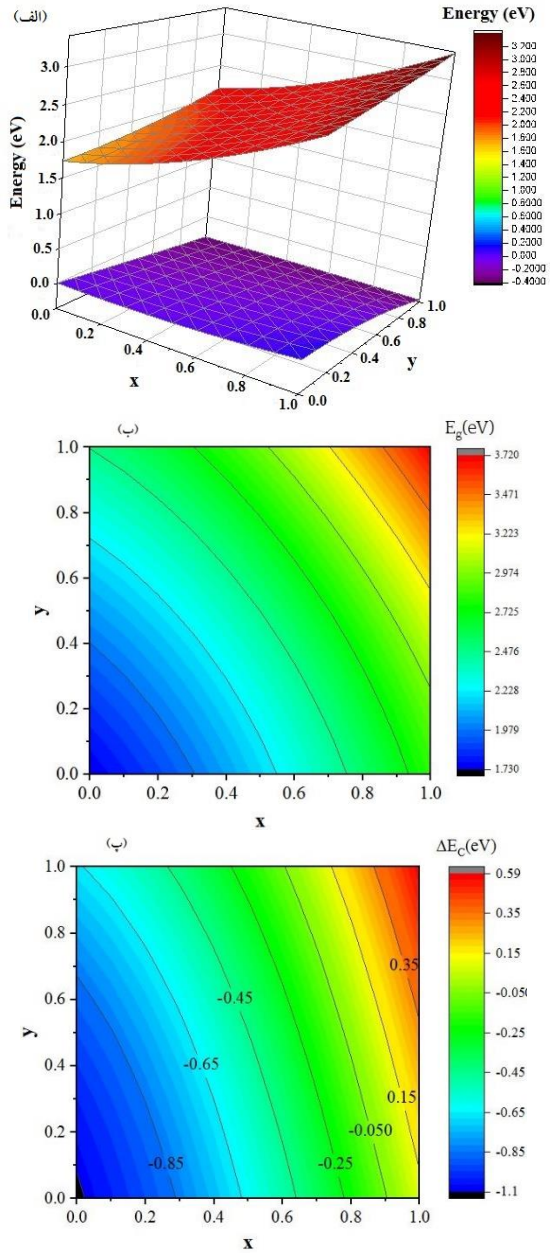
در $Zn_xCd_{1-x}S_ySe_{1-y}$ گاف انرژی با تغییر نسبت x=Zn/(Cd+Zn) و y=S/(S+Se) از مقدار ۱/۷۳ eV برای CdSe تا ۳/۷۲ eV برای ZnS تغییر می کند [۵]. گاف انرژی $Zn_xCd_{1-x}S_ySe_{1-y}$ از رابطه‌ی زیر بدست می‌آید [۵]:

$$E_g(Zn_xCd_{1-x}S_ySe_{1-y}) = 1.73 + 0.68x + 0.53y - 0.27xy + 0.41x^2 + 0.22y^2 + 0.2xy^2 + 0.22x^2y$$

تغییرات لبه‌ی نوار رسانش و نوار ظرفیت برای $Zn_xCd_{1-x}S_ySe_{1-y}$ برای مقادیر مختلف x و y در شکل ۳ الف نشان داده شده است. در این شکل لبه‌ی نوار رسانش CdSe به عنوان مرجع انرژی در نظر گرفته شده است. تغییرات گاف انرژی و خمیدگی لبه نوار رسانش در فصل مشترک لایه جاذب و ETL بر حسب مقادیر x و y در شکل ۳ ب و پ نشان داده شده است.

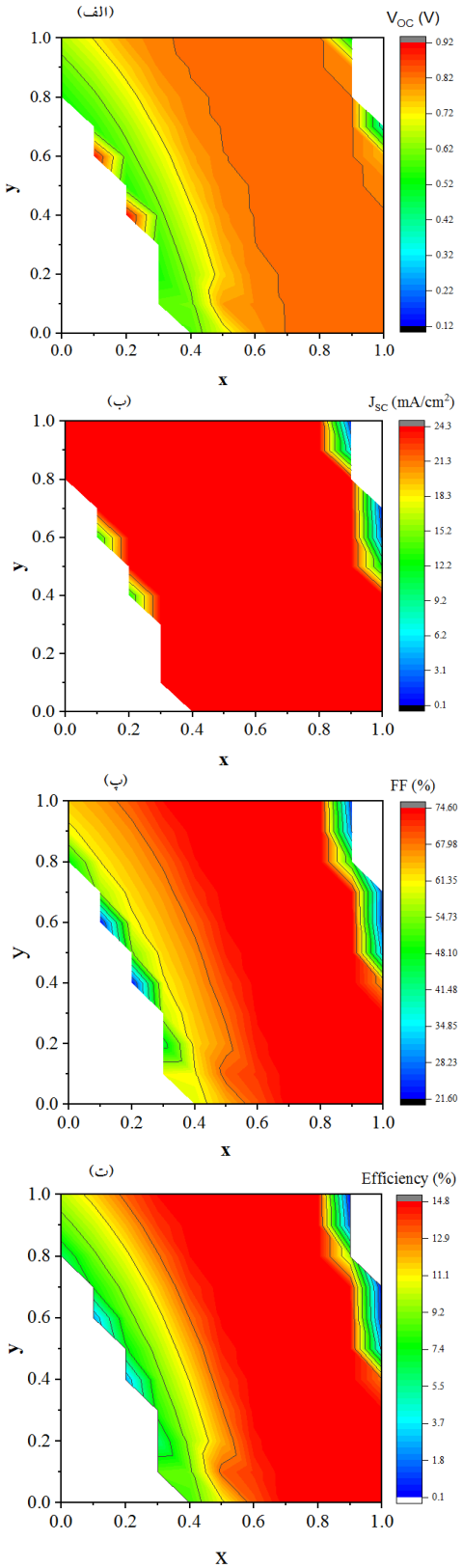
نتایج

بر اساس مدل ارئه شده در قسمت قبل، ETL رایج CdS با $Zn_xCd_{1-x}S_ySe_{1-y}$ جایگزین شده است و اثر تغییر نسبت x=Zn/(Cd+Zn) و y=S/(S+Se) در این لایه بر عملکرد سلول مورد بررسی قرار گرفته است. شکل ۴ الف تغییرات جریان مدار کوتاه (J_{SC})، ولتاژ مدار باز (V_{OC})، فاکتورپرشدگی (FF) و بازدهی (η) سلول را به عنوان تابعی از نسبت‌های x=Zn/(Cd+Zn) و y=S/(S+Se) نشان می‌دهد. برای مقادیر کم روی (Zn) و S (گوگرد) مقدار J_{SC} بسیار محدود است و بیشترین تغییرات با تغییر مقادیر x و y برای V_{OC} و FF اتفاق می‌افتد. با مقایسه شکل‌های ۳ پ و ۴ الف دیده می‌شود وقتی که خمیدگی نوار رسانش در فصل مشترک ETL و لایه جاذب مقدار منفی است با منفی تر شدن مقدار خمیدگی مقدار V_{OC} نیز کاهش می‌یابد و برای مقادیر منفی زیاد خمیدگی، اندازه‌ی V_{OC} به صفر می‌رسد و سلول بازدهی مفیدی نخواهد داشت. این تغییرات را می‌توان به شکل زیر توجیه کرد: برای مقادیر CBO منفی در فصل مشترک ETL و لایه جاذب، اختلاف انرژی بین مینیمم نوار رسانش ETL و ماکسیمم نوار ظرفیت لایه‌ی جاذب برابراست با انرژی فعال‌سازی بازترکیب در فصل مشترک [۶, ۷]. اگر بازترکیب در فصل مشترک، بازترکیب غالب باشد آنگاه انرژی فعال‌سازی به اندازه‌ی CBO از گاف انرژی لایه‌ی جاذب کمتر خواهد بود [۶, ۷]. در بایاس مستقیم مقدار منفی CBO به عنوان سدی در مقابل الکترون‌های تزریق شده عمل خواهد کرد و در نتیجه‌ی این سد بازترکیب حامل‌های اکثریت از طریق نقص‌هایی که در فصل مشترک ETL و لایه جاذب وجوددارند، اتفاق خواهد افتاد. بنابراین با منفی‌تر شدن مقدار CBO در فصل مشترک بازترکیب افزایش خواهد یافت و مقدار V_{OC} افت خواهد کرد [۸].



شکل ۱: الف) لبه‌ی نوار سانش و ظرفیت آلیاژ $Zn_xCd_{1-x}S_ySe_{1-y}$ ب) گاف انرژی پ) خمیدگی نوار رسانش در فصل مشترک لایه جاذب و ETL به صورت تابعی از x و y

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل ۲: تغییرات الف) VOC ب) JSC پ) FF و ت) بازدهی بر حسب x و y

مقدار J_{SC} برای محدوده‌ای از سلول که مقدار V_{OC} غیر صفر است، تقریبا ثابت است، زیرا مقدار J_{SC} عمدتا توسط گاف انرژی لایه‌ی جاذب تعیین می‌شود که در این کار ثابت در نظر گرفته شده است. از طرفی برای مقادیر مثبت و بزرگ به دلیل سد بزرگی که در مقابل انتقال الکترون‌ها از لایه‌ی جاذب به ETL وجود دارد، الکترون‌های کمتری جمع‌آوری می‌شوند و جریان افت می‌کند [۱]. نتایج پیشنهاد می کند که برای دستیابی به بهترین بازدهی مقدار x باید بین ۰/۴ تا ۰/۸ باشد.

نتیجه گیری

در این مطالعه ساختار سلول خورشیدی $Sb_2(S,Se)_3$ با ساختار الکترود/ETL/$Sb_2(S,Se)_3$/HTL/الکترود مورد بررسی قرار گرفت. ETL رایج CdS با $Zn_xCd_{1-x}S_ySe_{1-y}$ جایگزین شد، زیرا این لایه انعطاف بیشتری برای تغییر در ساختار نواری دارد. مقادیر بهینه نسبت‌های برای کارهای تجربی پیشنهاد شد.

مرجع‌ها

[۱]Y. Cao, X. Zhu, J. Jiang, C. Liu, J. Zhou, J. Ni, J. Zhang, J. Pang; Rotational design of charge carrier transport layers for optimal antimony trisulfide solar cells and its integration in tandem devices, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **206** (2020) 11027.۹

[۲]J. Dong, Y. Liu, Z. Wang, Y. Zhang; Boosting VOC of antimony chalcogenide solar cells: A review on interfaces and defects, *Nano Select* (2021.(

[۳]U.A. Shah, S. Chen, G.M.G. Khalaf, Z. Jin, H. Song; Wide bandgap Sb2S3 solar cells, *Adv. Funct. Mater* ۳۱ . .۲۱۰۰۲۶۵ (۲۰۲۱)

[۴]R. Tang, X. Wang, W. Lian, J. Huang, Q. Wei, M. Huang, Y. Yin, C. Jiang, S. Yang, G. Xing; Hydrothermal deposition of antimony selenosulfide thin films enables solar cells with 10% efficiency, *Nat. Energy* **5** (2020) 587-595.

[۵]R .Wang, M. Lan, Y. Zheng, J. Yang, B. Li, S.-H. Wei; Interface engineering of Cu (in, Ga) Se2 solar cells by optimizing Cd-and Zn-chalcogenide alloys as the buffer layer, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **13** (2021) 15237-15245.

[۶]I. Gharibshahian, A.A. Orouji ,S. Sharbati; Towards high efficiency Cd-Free Sb2Se3 solar cells by the band alignment optimization, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **212** (2020) 110581.

[۷]A. Crovetto, O. Hansen; What is the band alignment of Cu2ZnSn (S, Se) 4 solar cells?, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **169** (2017) 177-194.

[۸]T. Minemoto, T. Matsui, H. Takakura, Y. Hamakawa, T. Negami, Y. Hashimoto, T. Uenoyama, M. Kitagawa; Theoretical analysis of the effect of conduction band offset of window/CIS layers on performance of CIS solar cells using device simulation, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **67** (2001) 83-88.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تفاوت بهره‌های تقویت‌کننده پارامتری جوزفسون تبهگن و ناتبهگن و کاربرد آن در رادار چلانیده دو مدی کوانتومی

حسینی، سید محمد[۱]؛ نوروزی، میلاد[۲]؛ سیدیزدی، جمیله[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه ارومیه، ارومیه
[۲] گروه فیزیک، دانشگاه ولیعصر، رفسنجان

چکیده

از آنجاییکه بهره‌های تقویت‌کننده پارامتری جوزفسون در عملکرد تقویت‌کننده و بهبود عملکرد یک رادار کوانتومی، نقش کلیدی ایفا می‌کند، لذا در این کار تفاوت بهره‌های تقویت‌کننده پارامتری جوزفسون تبهگن و ناتبهگن و کاربرد آن را در یک رادار چلانیده دو مدی کوانتومی مورد ارزیابی قرار می‌دهیم. بهره توان تقویت کننده ناتبهگن رفتار بهینه‌تری را از خود نشان می‌دهد که منجر به بهبود نسبت سیگنال به نویز در رادار کوانتومی و در نتیجه بهبود عملکرد رادار چلانیده دو مدی کوانتومی می‌شود. همچنین یک افزایش ضریب کیفیت در مورد ناتبهگن وجود دارد که منجر به کاهش اتلاف انرژی می‌شود.

واژه های کلیدی: *تقویت‌کننده پارامتری جوزفسون،JPA تبهگن،JPA ناتبهگن، رادار کوانتومی.*

The difference between degenerate and non-degenerate Josephson parametric amplifiers gains and its application in quantum two-mode squeezed radar

Hosseiny, Seyed Mohammad[1]; Norouzi, Milad[2]; Seyed-Yazdi, Jamileh[2]

[1] *Department of Physics, University of Urmia, Urmia*
[2] *Department of Physics, Vali-e-Asr University of Rafsanjan*

Abstract

Since the gains of Josephson parametric amplifier play a key role in the amplifier performance and performance improvement of a quantum radar, in this work we evaluate the difference between the gains of a degenerate and non-degenerate Josephson parametric amplifier and its application in a two-mode squeezed radar. Non-degenerate amplifier power gain shows better behavior, which leads to improved signal-to-noise ratio in quantum radar and, consequently, improved quantum two-mode squeezed radar operation. There is also an increase in the quality factor of the non-degenerate case, which leads to a reduction in energy loss.

Keywords:*Josephson parametric amplifier, Degenerate JPA, Non-degenerate JPA, Quantum radar.*
PACS No. 74

مقدمه

تقویت، یک عنصر کلیدی در سنجش کوانتومی و پردازش اطلاعات کوانتومی است. برای مثال، بازخوانی کیوبیت‌های ابررسانا به تقویت کننده مایکروویو نیاز دارد که تا حد امکان نویز کمتری به سیگنال اضافه کند [۱]، که در حالت آرمانی به حد کوانتومی نزدیک می‌شود [۴-۲]. تقویت‌کننده‌های پارامتری کم‌نویز که توسط اتصالات غیرخطی جوزفسون کار می‌کنند، به طور منظم در آزمایش‌های اطلاعات کوانتومی ابررسانا استفاده می‌شوند [۱۴-۵]. برای ارزیابی عملکرد یک تقویت کننده پارامتری عملی، سه جنبه وجود دارد که به یک اندازه مهم هستند: (۱) نویز اضافه شده در حد کوانتومی [۱۵-۴]، (۲) تقویت پهنای باند [۱۹-۱۵]، و (۳)

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

توان اشباع بالا [۲۶-۹]، به عنوان مثال، توانایی حفظ بهره مورد نظر برای یک توان سیگنال ورودی بزرگ [۲۸، ۲۷].

نمونه‌ای از تقویت‌کننده‌های کم نویز، تقویت‌کننده مایکروویو جوزفسون است که عنصر اصلی تولید جریانی از فوتون‌های درهم‌تنیده، در رادارهای چلانیده دومدی کوانتومی است [۲۹].

بعد از توضیحی مختصر از عملکرد رادار چلانیده دو مدی در بخش دوم، توصیف تقویت‌کننده پارامتری جوزفسون در بخش سوم ارائه می‌شود و در انتها نتایج و بحث آورده می‌شوند.

رادار چلانیده دومدی کوانتومی QTMS

بطور کلی عملکرد یک رادار چلانیده دومدی بصورت زیر بیان می‌شود [۲۹]:

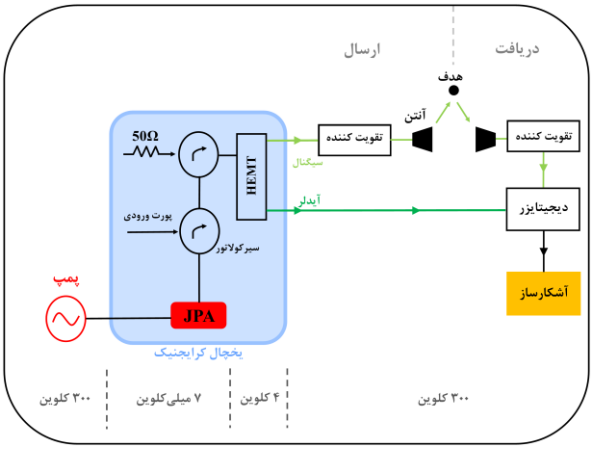
(۱) جریانی از جفت فوتون‌های درهم‌تنیده (سیگنال-آیدلر) توسط تقویت‌کننده‌ی پارامتری جوزفسون (JPA) تولید می‌شود.

(۲) سیگنال بعد از تقویت ارسال می‌شود و آیدلر حفظ می‌شود.

(۳) بعد از دریافت سیگنال در آنتن گیرنده، مچ فیلترینگ بین سیگنال و آیدلر اعمال می‌شود.

(۴) با استفاده از یک آشکارساز مناسب، حضور یا عدم حضور هدف قابل استنباط است.

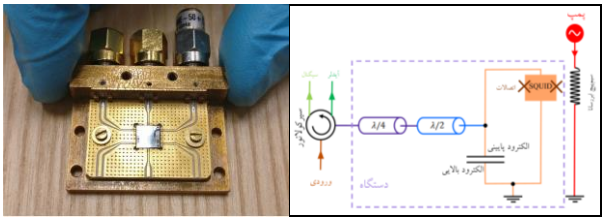
شکل ۱ طرحواره بلوکی یک رادار QTMS را نشان می‌دهد.



شکل ۱: طرحواره بلوکی یک رادار چلانیده دومدی کوانتومی و نحوه قرارگیری تقویت‌کننده جوزفسون در آن.

تقویت‌کننده پارامتری جوزفسون JPA

دستگاهی که برای تولید خلأ چلانیده دو مدی استفاده می‌شود (سیگنال درهم‌تنیده)، تقویت‌کننده پارامتری جوزفسون (JPA) نامیده می‌شود (شکل ۲). JPA اساساً یک کاواک تشدید مایکروویو با یک دستگاه تداخل‌سنج کوانتومی ابررسانا (SQUID) در انتهای آن است. SQUID حلقه‌ای از ماده ابررسانا با دو اتصال جوزفسون. می‌باشد. از آنجاییکه JPA نسبت به نویزهای حرارتی بسیار حساس است و دارای خواص ابررسانایی می‌باشد، لذا باید در یک یخچال رقیق‌ساز (دیلوشن کرایجنیک) تا دمای ۷ mK خنک شود. یک پورت ورودی برای میدان مغناطیسی در حال نوسان وجود دارد که SQUID در معرض آن قرار دارد و بر اساس شار ایجاد شده جریانی از فوتون‌های درهم‌تنیده تولید می‌شود [۲۹].



شکل ۲: آ) مدار یک JPA ب) نمای کلی یک JPA آزمایشگاهی [۲۹].

یک سیستم دو ترازی (کیوبیت) همراه با یک نوسانگر هارمونیک (تشدیدگر مایکروویو) معمولاً توسط هامیلتونی جینز-کامینگز توصیف می‌شود که پس از تقریب موج چرخان عبارت است از [۳۱-۳۰]:

$$H/\hbar = \omega_r\left(a^\dagger a+\frac{1}{2}\right)+\frac{\omega_a}{2}\sigma_z+g\left(\sigma_+ a+\sigma_- a^\dagger\right), \qquad (۱)$$

که در آن $a^\dagger$ و a عملگرهای خلق و نابودی نوسانگر هارمونیک است، σ_+ و σ_- عملگرهای بالا برنده و پایین آورنده کیوبیت، g ضریب جفت‌شدگی، ω_r و ω_a به ترتیب بسامدهای نوسانگر هارمونیک و کیوبیت هستند.

بر اساس پمپاژ پمپ دو نوع JPA وجود دارد [۳۱]:

۱. JPA تبهگن.

۲. JPA ناتبهگن.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

پمپاژ پارامتریک در دو فرکانس تشدید به عنوان پمپاژ تبهگن شناخته می‌شود، که در آن سیگنال و آیدلر فرکانس یکسانی دارند ($\omega_i \approx \omega_s$).

پمپاژ ناتبهگن به زمانی اطلاق می‌شود که فرکانس پمپ با مجموع دو فرکانس تشدید برابر باشد. سپس سیگنال و آیدلر به دو حالت مختلف جدا می‌شوند و فرکانس پمپ $\omega_p = \omega_s + \omega_i + 2\delta$ است که در آن $s \geq 0$، $i > s$ و δ واکوکی پمپ است [۳۱].

بهره توان سیگنال یک JPA تبهگن به صورت زیر به دست می‌آید [۳۳]:

$$G_{\mathrm{DJPA}}(\theta)=\frac{\left(\frac{\kappa_{\mathrm{ext}}^2-\kappa_{\mathrm{int}}^2}{4}+\epsilon^2\omega_0^2\right)^2+\epsilon^2\kappa_{\mathrm{ext}}^2\omega_0^2-2\epsilon\kappa_{\mathrm{ext}}\omega_0\left(\frac{\kappa_{\mathrm{ext}}^2-\kappa_{\mathrm{int}}^2}{4}+4\delta^2\omega_0^2\right)\sin(2\theta)}{\left(\frac{\kappa^2}{4}-\epsilon^2\omega_0^2\right)^2} \quad (۲)$$

که در آن θ فاز بین سیگنال مایکروویو و پمپ است. κ_{ext} نرخ اتلاف خارجی و κ_{int} نرخ اتلاف داخلی و $\kappa_{\mathrm{tot}} = \kappa_{\mathrm{ext}} + \kappa_{\mathrm{int}}$ است. ω_0 فرکانس تشدید تشدیدگر است. همچنین ضریب کیفیت داخلی و خارجی به ترتیب برابر $Q_{\mathrm{int}} = \omega_0 / \kappa_{\mathrm{int}}$ و $Q_{\mathrm{ext}} = \omega_0 / \kappa_{\mathrm{ext}}$ است. معادله (۲) فقط در حد زیر آستانه دامنه مدولاسیون $\epsilon \leq \epsilon_c = \kappa_{\mathrm{tot}} / 2\omega_0$ معتبر است. اگر درنظر بگیریم که $\kappa_{\mathrm{ext}} > \kappa_{\mathrm{int}}$، یا به طور دقیق‌تر $\left(\kappa_{\mathrm{ext}}^2 - \kappa_{\mathrm{int}}^2\right)/4 + \epsilon^2\omega_0^2 > 0$، بهره کمینه و بیشینه تبهگن به ترتیب برابرند با:

$$G_{\mathrm{DJPA}}^{\min} = \left(\frac{\epsilon_0 - \left(\kappa_{\mathrm{ext}} - \kappa_{\mathrm{int}}\right)/2}{\epsilon_0 + \left(\kappa_{\mathrm{ext}} + \kappa_{\mathrm{int}}\right)/2}\right)^2 \quad (۳)$$

$$G_{\mathrm{DJPA}}^{\max} = \left(\frac{\epsilon_0 + \left(\kappa_{\mathrm{ext}} - \kappa_{\mathrm{int}}\right)/2}{\epsilon_0 - \left(\kappa_{\mathrm{ext}} + \kappa_{\mathrm{int}}\right)/2}\right)^2 \quad (۴)$$

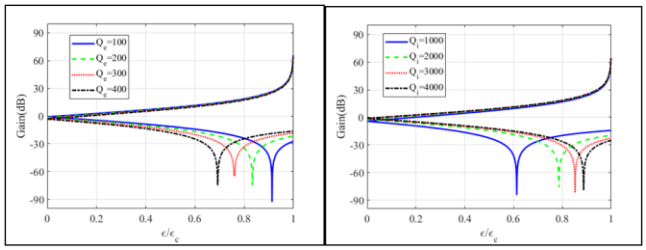
همچنین بهره توان سیگنال و آیدلر یک JPA ناتبهگن $\delta\omega \neq 0$ به صورت زیر به دست می‌آید [۳۳و۳۱]:

$$G_{NDJPA}^{S}(\delta\omega) = \frac{\kappa_{\mathrm{int}}^2\delta\omega^2 + \left[\left(\kappa_{\mathrm{int}}^2 - \kappa_{\mathrm{ext}}^2\right)/4 - \epsilon^2\omega_0^2 - \delta\omega^2\right]^2}{\kappa_{\mathrm{tot}}^2\delta\omega^2 + \left[\kappa_{\mathrm{tot}}^2/4 - \epsilon^2\omega_0^2 - \delta\omega^2\right]^2}, \quad (۵)$$

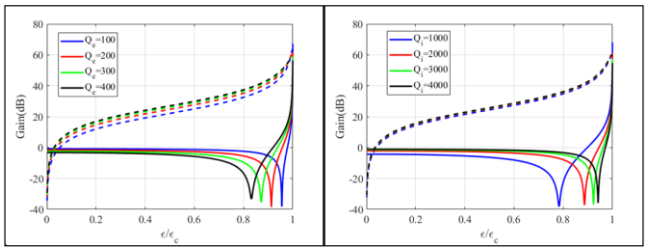
$$G_{NDJPA}^{i}(\delta\omega) = \frac{\kappa_{\mathrm{ext}}^2\epsilon^2\omega_0^2}{\kappa_{\mathrm{tot}}^2\delta\omega^2 + \left[\kappa_{\mathrm{tot}}^2/4 - \epsilon^2\omega_0^2 - \delta\omega^2\right]^2}, \quad (۶)$$

بحث و نتیجه

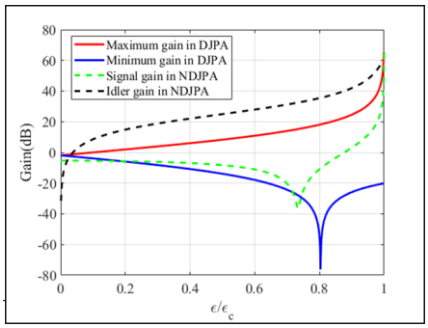
با توجه به فرمول‌های (۶-۳) نمودارهای مقایسه بین کمینه و بیشینه بهره سیگنال JPA تبهگن با افزایش ضرایب کیفیت داخلی شکل ۳آ) و خارجی شکل ۳ب)، مقایسه بهره سیگنال و آیدلر JPA ناتبهگن با افزایش ضرایب کیفیت داخلی شکل ۴آ)، و خارجی شکل ۴ب)، و مقایسه بهره توان JPA تبهگن و ناتبهگن در شکل ۵، بر حسب دامنه مدولاسیون نرمالیزه به ϵ_c، ترسیم شده است.



شکل ۳: مقایسه کمینه و بیشینه بهره توان سیگنال JPA تبهگن بر حسب دامنه مدولاسیون نرمالیزه به ϵ_c. آ) با افزایش ضریب کیفیت خارجی برای زمانیکه $Q_{\mathrm{int}} = 2200$ است. ب) با افزایش ضریب کیفیت داخلی برای زمانیکه $Q_{\mathrm{ext}} = 240$ است.



شکل ۴: مقایسه بهره توان سیگنال و آیدلر JPA ناتبهگن بر حسب دامنه مدولاسیون نرمالیزه به ϵ_c. آ) با افزایش ضریب کیفیت خارجی برای زمانیکه $Q_{\mathrm{int}} = 2200$ است. ب) با افزایش ضریب کیفیت داخلی برای زمانیکه $Q_{\mathrm{ext}} = 240$ است. (سیگنال: خط توپر، آیدلر: خط چین).



شکل ۵: مقایسه کمینه و بیشینه بهره توان سیگنال JPA تبهگن و بهره توان سیگنال و آیدلر JPA ناتبهگن برحسب دامنه مدولاسیون نرمالیزه به ϵ_c. برای زمانیکه $Q_{\mathrm{int}} = 2200, Q_{\mathrm{ext}} = 240$ است.

از مقایسه شکل ۳ و ۴، درمی‌یابیم که به دلیل اینکه در شکل ۴ آ) می‌توان ضریب کیفیت را افزایش داد، لذا اتلاف انرژی در تشدیدگر را می‌توانیم کاهش دهیم. در شکل ۵، مشاهده می‌شود که

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بهره توان سیگنال JPA ناتبهگن کمتر از بیشینه بهره توان JPA تبهگن است و عملکرد بهتری را از خود نشان می‌دهد، از این‌رو به دلیل کاهش چشمگیر بهره نسبت به مورد JPA تبهگن، انتظار داریم که عملکرد یک رادار کوانتومی زمانیکه از مورد ناتبهگن استفاده شود، بهبود یابد. دلیل فیزیکی این بهبود عملکرد، بهبود نسبت سیگنال به نویز رادار کوانتومی به دلیل کاهش بهره توان در JPA ناتبهگن است. لذا JPA ناتبهگن بعنوان یک گزینه آرمانی برای رادار کوانتومی می‌تواند انتخاب شود.

نتیجه‌گیری

مشاهده شد که بهره توان سیگنال و آیدلر JPA ناتبهگن، عملکرد بهتری نشان می‌دهد، لذا بهبود نسبت سیگنال به نویز در رادارهای چلانیده دو مدی کوانتومی وجود دارد که به نوبه خود عملکرد رادار کوانتومی را بهبود می‌بخشد. همچنین مشاهده شد که یک JPA ناتبهگن می‌تواند ضریب کیفیت بالاتر و در نتیجه اتلاف انرژی کمتری نسبت به مورد تبهگن داشته باشد. لذا پیشنهاد می‌شود در یک رادار چلانیده دو مدی کوانتومی از یک JPA ناتبهگن جهت بهبود عملکرد استفاده شود.

مرجع‌ها

[1] A. A. Clerk, M. H. Devoret, S. M. Girvin, F. Marquardt, and R. J. Schoelkopf, Introduction to quantum noise, measurement, and amplification, Rev. Mod. Phys. **82**, 1155 (2010).
[2] W. H. , A. Yariv, and A. E. Siegman, Quantum fluctuations and noise in parametric processes. I. Phys. Rev. **124**, 1646 (1961).
[3] J. P. Gordon, W. H. Louisell, and L. R. Walker, Quantum fluctuations and noise in parametric processes. II, Phys. Rev. **129**, 481 (1963).
[4] C.M. Caves, Quantum limits on noise in linear amplifiers, Phys. Rev. D **26**, 1817 (1982).
[5] M. A. Castellanos-Beltran and K. W. Lehnert, Widely tunable parametric amplifier based on a superconducting quantum interference device array resonator, Appl. Phys. Lett. **91**, 083509 (2007).
[6] M. A. Castellanos-Beltran, K. D. Irwin, G. C. Hilton, L. R. Vale, and K. W. Lehnert, Amplification and squeezing of quantum noise with a tunable josephson metamaterial, Nat. Phys. **4**, 929 (2008).
[7] T. Yamamoto, K. Inomata, M. Watanabe, K. Matsuba, T. Miyazaki, W. D. Oliver, Y. Nakamura, and J. S. Tsai, Fluxdriven Josephson parametric amplifier, Appl. Phys. Lett. **93**, 042510 (2008).
[8] N. Bergeal, F. Schackert, M. Metcalfe, R. Vijay, V. E. Manucharyan, L. Frunzio, D. E. Prober, R. J. Schoelkopf, S. M. Girvin, and M. H. Devoret, Phase-preserving amplification near the quantum limit with a Josephson ring modulator, Nature (London) **465**, 64 (2010).
[9] N. Bergeal, R. Vijay, V. E. Manucharyan, I. Siddiqi, R. J. Schoelkopf, S. M. Girvin, and M. H. Devoret, Analog information processing at the quantum limit with a Josephson ring modulator, Nat. Phys. **6**, 296 (2010).
[10] M. Hatridge, R. Vijay, D. H. Slichter, J. Clarke, and I. Siddiqi, Dispersive magnetometry with a quantum limited squid parametric amplifier, Phys. Rev. B **83**, 134501 (2011).
[11] N. Roch, E. Flurin, F. Nguyen, P. Morfin, P. Campagne-Ibarcq, M. H. Devoret, and B. Huard, Widely Tunable, Nondegenerate Three-Wave Mixing Microwave Device Operating Near the Quantum Limit, Phys. Rev. Lett. **108**, 147701 (2012).
[12] R. Vijay, D. H. Slichter, and I. Siddiqi, Observation of Quantum Jumps in a Superconducting Artificial Atom, Phys. Rev. Lett. **106**, 110502 (2011).
[13] J. E. Johnson, C. Macklin, D. H. Slichter, R. Vijay, E. B. Weingarten, J. Clarke, and I. Siddiqi, Heralded State Preparation in a Superconducting Qubit, Phys. Rev. Lett. **109**, 050506 (2012).
[14] C. Eichler, D. Bozyigit, and A. Wallraff, Characterizing quantum microwave radiation and its entanglement with superconducting qubits using linear detectors, Phys. Rev. A **86**, 032106 (2012).
[15] A. Metelmann and A. A. Clerk, Quantum-Limited Amplification Via Reservoir Engineering, Phys. Rev. Lett. **112**, 133904 (2014).
[16] L. Spietz, K. Irwin, J. Aumentado, Superconducting quantum interference device amplifiers with over 27 GHz of gainbandwidth product operated in the 4–8 GHz frequency range, Appl. Phys. Lett. **95**, 092505 (2009).
[17] T. C. Chien, O. Lanes, C. Liu, X. Cao, P. Lu, S. Motz, G. Liu, D. Pekker, and M. Hatridge, Multiparametric amplification and qubit measurement with a Kerr-free Josephson ring modulator, arXiv:1903.02102 [Phys. Rev. A (to be published)].
[18] A. Metelmann, A. A. Clerk, Nonreciprocal Photon Transmission and Amplification Via Reservoir Engineering, Phys. Rev. X **5**, 021025 (2015).
[19] Q. Zhong, S. K. Ozdemir, A. Eisfeld, A. Metelmann, and R. El-Ganainy, Exceptional Points-Based Optical Amplifiers, Phys. Rev. Appl. **13**, 014070 (2020).
[20] A. Kamal, A. Marblestone, and M. Devoret, Signal-topump back action and self-oscillation in double-pump Josephson parametric amplifier, Phys. Rev. B **79**, 184301 (2009).
[21] B. Abdo, A. Kamal, M. Devoret, Nondegenerate three-wave mixing with the Josephson ring modulator, Phys. Rev. B **87**, 014508 (2013).
[22] C. Eichler and A. Wallraff, Controlling the dynamic range of a Josephson parametric amplifier, EPJ Quantum Tech. **1**, 2 (2014).
[23] B. A. Kochetov and A. Fedorov, Higher-order nonlinear effects in a Josephson parametric amplifier, Phys. Rev. B **92**, 224304 (2015).
[24] G. Liu, T.-C. Chien, X. Cao, O. Lanes, E. Alpern, D. Pekker, and M. Hatridge, Josephson parametric converter saturation and higher order effects, Appl. Phys. Lett. **111**, 202603 (2017).
[25] N. E. Frattini, V. V. Sivak, A. Lingenfelter, S. Shankar, M. H. Devoret, Optimizing the nonlinearity and dissipation of SNAIL parametric amplifier for dynamic range, Phys. Rev. Appl. **10**, 054020 (2018).
[26] A. Roy and M. Devoret, Quantum-limited parametric amplification with Josephson circuits in the regime of pump depletion, Phys. Rev. B **98**, 045405 (2018).
[27] D. M. Pozar, *Microwave Engineering*, 4th ed. Wiley, New York, 2011.
[28] L. Chenxu, T. Chien, M. Hatridge, and D. Pekker, Optimizing Josephson-ring-modulator-based Josephson parametric amplifiers via full Hamiltonian control, Phys. Rev. A **101**, 042323 (2020).
[29] D. Luong, CW Sandbo Chang, A. M. Vadiraj, A. Damini, C. M. Wilson, and B. Balaji, Receiver operating characteristics for a prototype quantum two-mode squeezing radar. *IEEE Trans. Aerosp. Electron. Syst.* **56**, 2041-2060 (2019).
[30] A. Blais, R.-S. Huang, A. Wallraff, S. M. Girvin, and R. J. Schoelkopf, Cavity quantum electrodynamics for superconducting electrical circuits: An architecture for quantum computation, *Phys. Rev. A* ***69***, 062320 (2004).
[32] Pogorzalek, Stefan, Kirill G. Fedorov, Ling Zhong, Jan Goetz, Friedrich Wulschner, Michael Fischer, Peter Eder et al. "Flux-driven Josephson parametric amplifiers: Hysteretic flux response and nondegenerate gain measurements." *arXiv preprint arXiv:1609.09041* (2016).
[33] Krüger, Philipp, and Kirill G. Fedorov. "*Fortgeschrittenenpraktikum: The Josephson Parametric Amplifier*." 2021.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مطالعه‌ی حسگر گازی بر پایه‌ی تک‌لایه‌ی ژرمانیوم‌سلناید در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی

نجاتی‌پور، ریحان

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه لرستان، خرم‌آباد، لرستان، ایران

چکیده

در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی (DFT)، با استفاده از پایه‌های اربیتالی اتم‌مرکز عددی (NAOs) و روش پتانسیل کامل، جذب سطحی مولکول‌های گازی هیدروژن (H_2)، کربن‌مونوکسید (CO) و متان (CH_4) توسط تک‌لایه‌ی ژرمانیوم‌سلناید (GeSe) مطالعه می‌گردد. فواصل تعادلی بین لایه و مولکول‌ها و انتقال بار بین این دو مورد محاسبه و بررسی قرار می‌گیرد. تحلیل چگالی حالت‌ها نشان می‌دهد که میزان بالای انتقال بار بین CO و لایه، و نیز CH_4 و لایه صورت می‌گیرد. جذب مولکول CO موجب هیبرید اربیتال‌های الکترونی مولکول و لایه، پیدایش حالت‌های ناخالصی در ناحیه‌ی گاف نواری لایه و درنتیجه، کاهش گاف الکترونی آن می‌گردد. در حضور مولکول CH_4 نیز گاف الکترونی لایه به‌میزان ۰/۱٤ eV کاهش می‌یابد. باتوجه به داده‌ها و تحلیل‌های ارائه‌شده، تک‌لایه‌ی GeSe می‌تواند نقش یک حسگر را برای گازهای مورد مطالعه ایفا کند.

واژه های کلیدی: *حسگر گازی، تک‌لایه‌ی ژرمانیوم‌سلناید (GeSe)، انتقال بار، نظریه‌ی تابعی چگالی (DFT).*

Study of the gas sensor based on the germanium selenide monolayer by the density functional theory

Nejatipour, Reihan

Department of Physics, Faculty of Sciences, Lorestan University, Khoramabad, Lorestan, Iran

Abstract

In the framework of the density functional theory (DFT), by means of the numeric atom-centered orbitals (NAOs) and full potential method, the adsorption of gas molecules of hydrogen (H_2), carbon monoxide (CO) and methane (CH_4) by the germanium selenide (GeSe) monolayer are studied. The balance distances between the layer and molecules and the charge transfer between them are calculated and investigated. The analysis of the densities of states shows that the large amount of the charge transfer between CO and the layer is occurred. The adsorption of the CO molecule causes the hybridization of molecule and layer orbitals, the appearance of impurity states in the band gap region, and therefore, a decrease in its electronic band gap. In the presence of CH_4 molecule the electronic band gap of the layer is decrease in amount of 0.14 eV. Paying attention to the data and the presented analyses, the monolayer GeSe can play a gas sensor role for the studied gas molecules.

***Keywords**: Gas sensor, Germanium selenide monolayer (GeSe), charge transfer, Density functional theory (DFT).*

PACS No. 68, 73, 81.

مقدمه

پس از کشف گرافین به‌عنوان اولین ماده‌ی دوبعدی، تولید و توسعه‌ی مواد دوبعدی بدون محدودیت‌های گرافین شدت گرفت و موضوع روز مقالات علمی متعدد شد [۳-۱]. مواد دوبعدی پتانسیل استفاده در صنایع متعدد همچون قطعات الکترونیکی و فوتوولتایی، ذخیره‌سازی انرژی و نیز حسگرهای گازی را دارند. تک‌لایه‌ی ژرمانیوم‌سلناید از جمله‌ی این مواد و از دسته‌ی تک‌کالکوژن‌های گروه IV جدول تناوبی است که نیم‌رسانای نوع p و دارای قابلیت جایگزینی در کالکوژنهای سربی برای کاربردهای فوتوولتایی است. آشکارسازی مولکول‌های گازی، به‌ویژه نوع خطرآفرین و سمّی آن، موضوع مهمی در صنایع مختلف همچون نفت و گاز، و نیز کشاورزی و سلامت عمومی است. بدلیل نسبت بالای سطح به حجم

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

و نیز برهمکنش قوی بین مولکول گازی و تک‌لایه، ژرمانیوم‌سلناید نیز می‌تواند به‌عنوان حسگر مولکول گازی آمونیاک (NH_3) ایفای نقش کند [٤]. پیش‌بینی می‌شود که این ترکیب که همچون فسفرین دارای ساختاری شش‌ضلعی و چین‌خورده، و دارای گاف الکترونی مناسب است، پتانسیل آشکارسازی دیگر مولکول‌های گازی همچون متان (CH_4)، کربن‌مونوکسید (CO) و نیز هیدروژن (H_2) را داشته باشد. بنابراین، پژوهش حاضر با استفاده از محاسبات ابتدابه‌ساکن به بررسی و مطالعه و امکان‌سنجی این قابلیت می‌پردازد.

روش محاسبات

مطالعه‌ی حاضر در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی با استفاده از بسته‌ی محاسباتی FHI-aims صورت گرفته است [۳]. معادلات کان–شم با استفاده از روش پتانسیل کامل با پایه‌های اربیتالی اتم‌مرکز عددی مطابق با معادله‌ی (۱) حل شده‌اند.

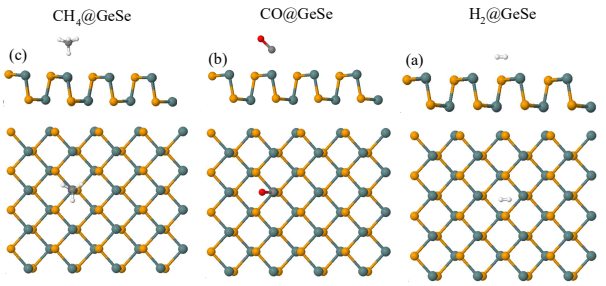
$$\varphi_i(r) = \frac{u_i(r)}{r} Y_{lm}(\Omega) \qquad (۱)$$

که در آن، $u_i(r)$ توابع شعاعی جدول‌بندی‌شده و $Y_{lm}(\Omega)$ هماهنگ‌های کروی هستند. هر تابع شعاعی در معادله‌ای صدق می‌کند که با دو پتانسیل تعریف می‌شود: پتانسیل اول رفتار اصلی $u_i(r)$ را تعیین می‌کند. از آنجایی که هر تابع شعاعی باید در خارج از یک شعاع محدودکننده به آرامی به صفر برسد، پتانسیلی عمیقاً محدودکننده به پتانسیل اول اضافه می‌گردد. در این روش، انتخاب مجموعه‌ی پایه‌ی وابسته‌به‌عنصر تا حصول دقت meV برای انرژی و بر اساس بهینه‌سازی کامل کمیت‌های فیزیکی صورت گرفت.

برای محاسبه‌ی انرژی تبادلی–همبستگی از تقریب چگالی موضعی (LDA) با تابعی پردو و وانگ استفاده شد [٤]. به‌منظور جلوگیری از برهم‌کنش مولکول‌های گازی مجاور، ابرياخته‌ای به ابعاد ۵×۵، و ابعاد فضای وارون برای محاسبه‌ی خواص الکترونی، ۱×٦×٦ انتخاب گردید.

نتایج و بحث

شکل ۱ ساختار تک‌لایه‌ی GeSe را به‌همراه موقعیت‌های بهینه برای جذب مولکول‌های گازی نشان می‌دهد. مکان بهینه با کمترین انرژی برای مولکول H_2 موازی با لایه و متمایل به مرکز چهارضلعی است، در حالیکه برای مولکول CO جذب به‌گونه‌ای است که پیوند C-O در زاویه با سطح لایه و تقریباً بالای اتم ژرمانیوم قرار دارد. برای مولکول متان نیز در جهت یکی از اتم‌های هیدروژن و در مجاورت اتم ژرمانیوم جذب رخ می‌دهد. مکان بهینه‌ی جذب، انرژی جذب و میزان انتقال بار برای هر مولکول در جدول ۱ بیان شده است.



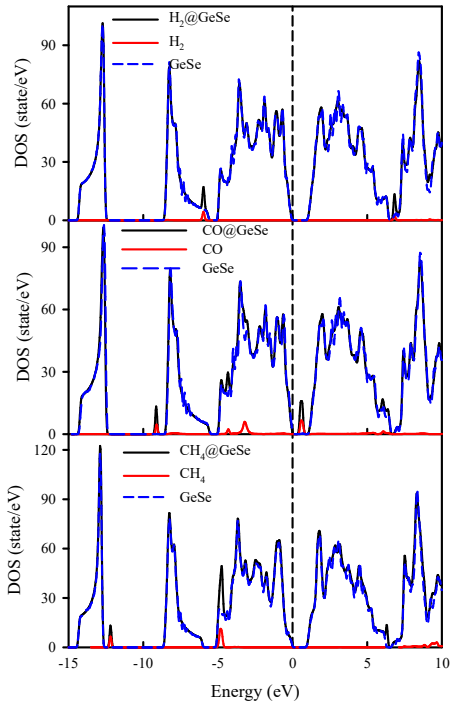
شکل ۱. جذب سطحی مولکول گازهای a) هیدروژن، b) کربن‌مونوکسید، و c) متان بر تک‌لایه‌ی GeSe از نماهای جانبی و بالا. اتمهای تیره و روشن در لایه به‌ترتیب Ge و Se هستند.

انرژی‌های جذب منفی نشان از گرمازا بودن فرایند جذب هر سه مولکول دارد. در بررسی میزان انتقال بار بین مولکول‌های گازی و لایه، مشاهده می‌شود که مولکول‌های CO و H_2 نقش دهنده پذیرنده‌ی بار را ایفا می‌کنند، و این درحالی‌ست که این نقش با جایگزینی مولکول متان به دهنده‌ی بار تغییر می‌کند. مقادیر منفی و مناسب انرژی جذب، حاکی از این است که تک‌لایه‌ی GeSe می‌تواند به هر سه مولکول مورد مطالعه حساس باشد. بررسی برهم‌کنش بین لایه و مولکول‌ها با بررسی انتقال بار بین این دو قضاوت می‌شود. میزان انتقال بار از تحلیل بَدِر [۵] نشان می‌دهد که مطابق با جدول ۱، مولکول‌های H_2، CO به‌ترتیب ۰/۰۰۹e و ۰/۲٤e بار از لایه دریافت می‌کنند و مولکول CH_4 به میزان ۰/۱۸۷e بار به لایه منتقل می‌کند.

جدول ۱. مکان بهینه‌ی جذب، انرژی جذب و میزان انتقال بار برای مولکول‌های H_2، CO و CH_4 بر لایه‌ی GeSe.

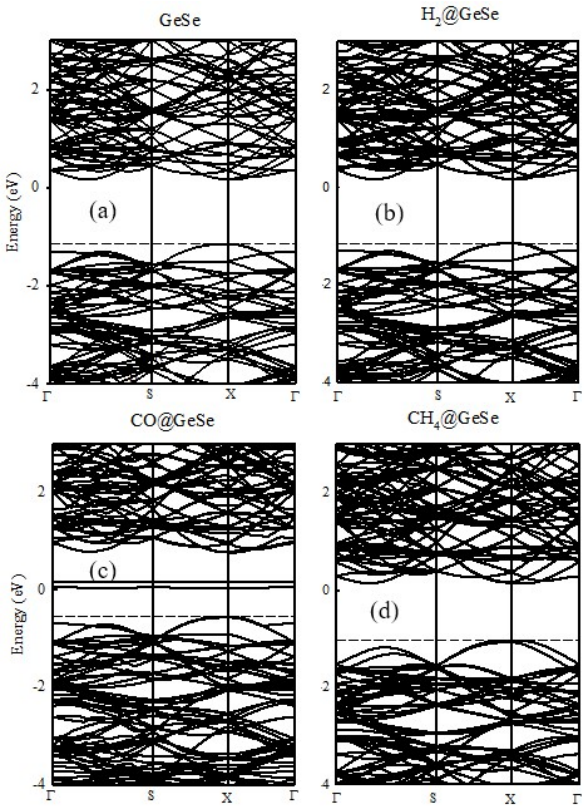
مولکول گازی	مکان بهینه جذب	انرژی جذب	میزان انتقال بار
H_2	۲/۱۵	-۰/۱٦۱	۰/۰۰۹
CO	۲/٦۳	-۰/۳۹۳	۰/۲٤۰
CH_4	۲/۵۷	-۱/۵۸٤	-۰/۱۸۷

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل ۲. چگالی حالت‌های الکترونی کل و جزئی مولکول‌های H_2 (بالا)، CO (وسط) و CH_4 (پایین) جذب‌شده بر تک‌لایه‌ی GeSe. انرژی بالاترین نوار ظرفیت با خط‌چین نمایش داده شده است.

مقادیر بالای انتقال بار بین لایه و مولکول‌ها می‌تواند منجر به تغییرات چشم‌گیر در خواص الکترونی گردد، بطوری‌که در اندازه‌گیری‌های آزمایشگاهی نمود پیدا کند. برای بررسی این موضوع، به مطالعه‌ی چگالی حالت‌ها و ساختار نواری لایه‌ی GeSe در حضور هر یک از مولکول‌های گازی می‌پردازیم. شکل ۲ چگالی حالات الکترونی تک‌لایه‌ی GeSe در حضور مولکول‌های گازی را نشان می‌دهد. پیداست که جذب هیدروژن توسط لایه‌ی GeSe تغییر چشم‌گیری در چگالی حالات این لایه و حتی در مقدار گاف الکترونی ایجاد نمی‌کند. تنها اثر آن، ایجاد حالت‌هایی در دسترس با پهنای کوچک در انرژی ٦/٠ eV- زیر تراز فرمی و ٦/٨٧ eV بالای تراز فرمی است. در حضور کربن‌مونوکسید تغییرات الکترونی قابل‌توجه است، به‌این صورت که علاوه بر تغییرات در چگالی حالت‌ها، گاف نواری به ٠/٥٩ eV کاهش یافته است. دلیل این کاهش چشم‌گیر گاف نواری، ظهور حالت‌هایی از CO بالای تراز فرمی در بازه‌ی انرژی ٠/٣٦ تا ٠/٨٦ eV است. حالت‌های الکترونی در زیر و بالای تراز فرمی، نشان‌دهنده‌ی انتقال بار بین مولکول CO و لایه است. از شکل ۲ برمی‌آید که این انتقال بار میان متان (CH_4) و لایه نیز قابل‌توجه است. جذب این مولکول، حالت‌های در دسترس زیر تراز فرمی را نیز افزایش می‌دهد. این افزایش در بازه‌های انرژی ١٢/٣٥- تا ١١/٩٠ eV- و نیز ٥/١- تا ٤/٤١ eV است. به‌علاوه، جذب سطحی مولکول CH_4 گاف نواری تک‌لایه‌ی GeSe را به ١/١٧ eV، یعنی به‌میزان ٠/١٤ eV کاهش می‌دهد.



شکل ۳. ساختار نواری لایه‌ی a) GeSe، در اثر جذب مولکول‌های b) H_2، c) CO و d) CH_4. انرژی بالاترین نوار ظرفیت با خط‌چین نمایش داده شده است.

به‌منظور مطالعه‌ی بیشتر اثر جذب سطحی مولکول‌ها بر لایه‌ی GeSe، ساختار نواری این ترکیب در حضور مولکول‌ها محاسبه و در شکل ۳ نشان داده شده است. در این شکل، بالاترین تراز اشغال‌شده با خط‌چین مشخص شده است. اثر جذب هیدروژن بر ساختار نواری GeSe، چه در پاشندگی نوارها و چه در مقدار گاف نواری ناچیز است و این مطابق با تحلیل حاصل از چگالی حالت‌ها است. جذب مولکول کربن‌مونوکسید سبب پیدایش حالت‌های

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

ناخالصی و نوارهای الکترونی در ناحیه‌ی گاف GeSe، و درنتیجه کاهشی بزرگ به‌مقدار ۰/۷۲ در گاف الکترونی شده است. این حالت‌های ناخالصی عمدتاً الکترون‌های p اتم‌های کربن و اکسیژن هستند. به‌علاوه، شکافتگی‌های کوچک هم در نوار ظرفیت و هم در نوار رسانش، حاصل از هیبریداسیون جزئی بین اربیتال‌های مولکول و لایه مشهود است.

در خصوص جذب مولکول متان، شکافتگی نوارهای دقیقاً زیر تراز فرمی از Γ به S و از X به Γ بیشتر و قابل‌ملاحظه است. به‌دلیل هیبریداسیون بین اربیتال‌های p اتم کربن از متان و اربیتال‌های اتم‌های ژرمانیوم و سلنیوم در لایه، این شکافتگی‌ها رخ داده است. تحلیل ساختار نواری نیز، کاهش گاف الکترونی در حضور و جذب سطحی مولکول متان را به میان ۰/۱٤ eV تایید می‌کند.

نتیجه‌گیری

در قیاس با مولکول‌های هیدروژن و کربن‌مونوکسید، میزان انرژی جذب برای مولکول متان بسیار بیشتر است. اگرچه آشکارسازی مولکول هیدروژن نیز در دسترس است، نظر به میزان قابل توجه انتقال بار، برهم‌کنش بین لایه با مولکول‌های کربن‌مونوکسید و متان قوی است، و درنتیجه آشکارسازی این‌دو توسط لایه می‌تواند کاملاً موفقیت‌آمیز باشد.

سپاسگزاری

از همکاری کارکنان شرکت گاز استان لرستان، آقایان کرم گودرزی و مسلم پارسا، صمیمانه تشکر می‌کنم. اینکار با پشتیبانی مالی شرکت گاز استان لرستان انجام شد.

مرجع‌ها

[۱] L. Song, L. Ci, H. Lu, P.B. Sorokin, C. Jin, J. Ni, A.G. Kvashnin, D.G. Kvashnin, J. Lou, B.I. Yakobson, and P.M. Ajayan, *Nano Lett.* **10**, 3209 (2010)

[۲] K.S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T.J. Booth, V.V. Khotkevich, S.V. Morozov, and A.K. Geim, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **102**, 10451 (2005).

[۳] K.F. Mak, C. Lee, J. Hone, J. Shan, and T.F. Heinz, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 136805 (2010).

[٤] L. Liu, Q. Yang, Z. P. Wang, H. Y. Ye, X. P. Chen, X. J. Fan and G. Q. Zhang, *Appl. Surf. Sci.*, **433**, 575 (2018).

[٥] V. Havu, V. Blum, P. Havu, and M. Scheffler, *J. Comp. Phys.*, **228**, 8367 (2009).

[٦] J. P. Perdew and Y. Wang, *Phys. Rev. B* **45**, 13244 (1992).

[۷] G. Henkelman, A. Arnaldsson and H. Jonsson, *Comput. Mater. Sci.*, **36**, 354 (2006).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

پاسخ‌های معادله کلاین-گوردون D - بعدی در حضور پتانسیل هایپربولیک با بکارگیری تقریب گرین - آلدریش

روشن‌ضمیر، محمد

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

چکیده

*در این تحقیق پاسخ‌های تقریبی مربوط به پتانسیل شیوبرگ در چارچوب مکانیک کوانتومی نسبیتی و غیرنسبیتی با استفاده از روش نیکیفوروف - یواروف در **D**- بعد با استفاده از تقریب گرین - آلدریش بدست آمده و طیف انرژی و توابع موج بهنجار مربوطه برای حالت غیر صفر اندازه حرکت زاویه‌ای ارائه شده است.*

واژه های کلیدی: *معادله کلاین- گوردون، پتانسیل شیوبرگ، تقریب گرین - آلدریش.*

Solutions of the D-dimensional Klein-Gordon equation in the presence of hyperbolic potential using the Greene-Aldrich approximation

Roshanzamir, Muhammad

Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Shahrekord University, Shahrekord

Abstract

In this research, the approximate solutions for the Schiöberg potential is studied in the framework of relativistic and nonrelativistic quantum mechanics in D-dimensions using the Nikiforov-Uvarov approach and the Greene-Aldrich approximation scheme and the energy spectrum and the corresponding normalized wave functions for the $\ell \neq 0$ states are investigated.

***Keywords**: Klein-Gordon equation, Schiöberg potential, Greene-Aldrich approximation.*

PACS No. 2

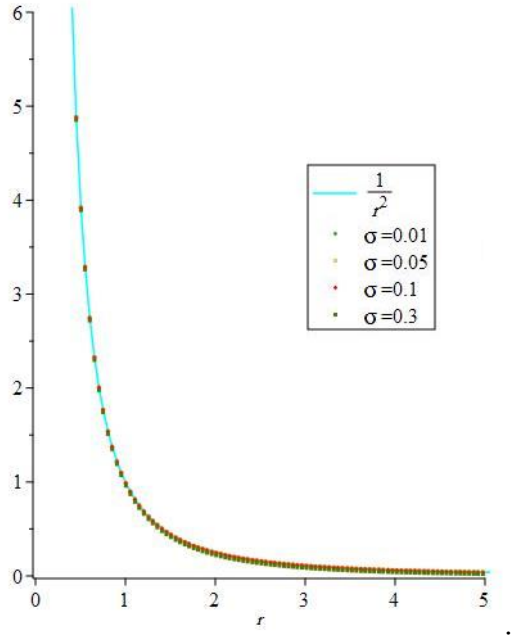
مقدمه

در دهه‌های اخیر مطالعه طیف انرژی مربوط به پتانسیل‌های نوع نمایی در حوزه‌های نسبیتی و غیرنسبیتی در کانون توجه محققان این حوزه قرار گرفته است [۲،۱]. سیستم‌های شامل پتانسیل نوع نمایی را برای حالت‌های $\ell \neq 0$ به‌دلیل در بردا شتن جمله گریز از مرکز تنها می‌توان با روش‌های تقریبی مورد بررسی قرار داد. در این صورت، اثر این جمله را می‌توان با بازتعریف پارامتر ها شبیه‌سازی نمود و لذا تقریب گرین- آلدریش به فرم $1/r^2 \approx 4\varsigma^2 e^{-2\varsigma r}/\left(1-e^{-2\varsigma r}\right)^2$ ارائه می‌گردد [۳]. پتانسیل شیوبرگ بعنوان پتانسیل مولکولی کاربردهای وسیعی در آمار کوانتومی [۴]، نظریه میدان همدیس [۵]، ساختار هسته‌ای [۶] و شیمی فیزیک [۷] دارد. این پتانسیل به فرم

$$V_{MHt}(r) = \frac{2S\left((\upsilon-1)e^{2\varsigma r}+\upsilon+1\right)^2}{\left(e^{2\varsigma r}-1\right)^2}, \qquad (۱)$$

بیان می‌گردد به‌طوری که ς و S به ترتیب مبین پارامتر پوششی و شدت جفت‌شدگی بوده [۸] و υ پارامتر پتانسیل است.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل ۱ : نمودار $1/r^2$ و تقریب متناظر با آن به ازای $\varsigma = 0.01, 0.05, 0.1, 0.3$.

محاسبه دقیق رابطه پاشندگی و حل تحلیلی چنین سیستم‌هایی می‌تواند بطور نظری و تجربی نتایج جالب توجه کاربردی داشته باشد.

رهیافت نیکیفروف- یووارف

یکی از ابزارهای محاسباتی مورد استفاده در یافتن پاسخ‌های معادلات روش نیکیفروف- یووارف بوده که بر پایه حل معادلات دیفرانسیلی مرتبه دوم نوع فوق هندسی با استفاده از توابع متعامد ویژه است [۹]. معادله عمومی که بدین روش مربوط است به فرم

$$\psi_n''(r)+\frac{\tilde{\tau}(r)}{\sigma(r)}\psi_n'(r)+\frac{\tilde{\sigma}(r)}{\sigma(r)}\psi_n(r)=0, \qquad (۲)$$

بوده که $\tilde{\tau}(r)$ چندجمله‌ای از مرتبه یک، $\sigma(r)$ و $\tilde{\sigma}(r)$ چندجمله‌ای‌هایی حداکثر از مرتبه دوم می‌باشند. برای یافتن پاسخ معادله (۲)، تابع موج $\psi_n(r)$ را به فرم $\psi_n(r)=y_n(r)\varphi(r)$ در نظر گرفته و با بکارگیری رابطه $(\sigma(r)\rho(r))'=\tau(r)\rho(r)$ به فرم فوق هندسی

$$\sigma(r)y_n''(r)+\tau(r)y_n'(r)+\lambda y_n(r)=0, \qquad (۳)$$

می‌رسیم که

$$\tau(r)=\tilde{\tau}(r)+2\pi(r);\tau'(r)<0,\ \lambda=\lambda_n=k+\tilde{\pi}(r)$$
$$=-n\tilde{\tau}(r)-1/2n(n-1)\sigma''(r),\quad n=0,1,2,....$$

$\pi(r)$ چندجمله‌ای از مرتبه حداکثر یک می‌باشد. در این‌صورت جواب معادله مجذوری چندجمله‌ای $\pi(r)$ بصورت

$$\pi(r)=\frac{\sigma'(r)-\tilde{\tau}(r)}{2}$$
$$\pm\left(\frac{(\sigma'(r)-\tilde{\tau}(r))^2-\tilde{\sigma}(r)+k\,\sigma(r)}{4}\right)^{\frac{1}{2}}, \qquad (۴)$$

نمایان می‌گردد. پاسخ‌های چندجمله‌ای $y_n(r)$ را می‌توان برحسب رابطه رودریگز[۱]

$$y_n(r)=\frac{B_n}{\rho(r)}\frac{d^n}{dr^n}\left[\sigma^n(r)\rho(r)\right]$$

بیان نمود که B_n ثابت بهنجارش بوده و $\rho(r)$ تابع وزنی است که عبارت $\rho(r)=\sigma^{-1}(r)\exp\left(\int\tau(r)\sigma^{-1}(r)dr\right)$ را برآورد می‌سازد. همچنین قسمت دوم تابع موج $\psi_n(r)$ بصورت $\varphi(r)=\exp\left(\int\pi(r)\sigma^{-1}(r)dr\right)$ تحویل می‌یابد.

مطالعه طیف انرژی در حضور پتانسیل شیوبرگ

معادله کلاین- گوردون به ازای پتانسیل اسکالر $S(r)$ و پتانسیل برداری $V(r)$ در D-بعد به فرم

$$\left(\hbar^2c^2\nabla_D^2-\left(\mu c^2+S(r)\right)^2\right.$$
$$\left.+\left(E_{n,\ell}-V(r)\right)^2\right)\Psi(r,\Omega_D)=0,$$

[۱] Rodriguez relation

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

ارائه شده بطوری‌که ∇_D^2 معرف عملگر لاپلاس در D–بعد و به فرم

$$\nabla_D^2=\frac{1}{r^{D-1}}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^{D-1}\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{1}{r^2}\Lambda_D^2(\Omega_D)$$

قابل بیان است. لازم به یادآوری است D مبین بعد فضایی و $\hbar$ معرف ثابت کاهش یافته پلانک و μ، c و $E_{n,\ell}$ به ترتیب مبین جرم ذره، سرعت نور و انرژی نسبیتی ذره است. پتانسیل اسکالر جاذب به طور معمول تحت شرایط میدان استاتیکی و پتانسیل برداری تحت شرایط دینامیکی اعمال می‌گردد. پتانسیل اسکالر $S(r)$ به عنوان کمیتی لحاظ شده که به جرم ذره μ، اضافه می‌گردد. همچنین می‌توان تابع موج کلی در D–بعد را به فرم $\Psi(r,\Omega_D)=r^{\frac{1-D}{2}}U_{n,\ell}(r)Y_{\ell,m}(\Omega_D)$ نگاشت به‌طوری که $Y_{\ell,m}(\Omega_D)$ تابع هارمونیک کروی تعمیم‌یافته است. با بهره‌گیری از ویژه مقادیر عملگر اندازه‌حرکت زاویه‌ای تعمیم‌یافته به نحوی که $\Lambda_D^2(\Omega_D)Y_{\ell,m}(\Omega_D)=\ell(\ell+D-2)Y_{\ell,m}(\Omega_D)$ بخش شعاعی معادله کلاین- گوردون D–بعدی را می‌توان به فرم

$$\left(\hbar^2c^2\frac{d^2}{dr^2}+\left(E_{n,\ell}^2-\mu^2c^4\right)-2\left(\mu c^2S(r)+E_{n,\ell}V(r)\right)+V^2(r)-S^2(r)-\frac{K(K+1)\hbar^2c^2}{r^2}\right)U_{n,\ell}(r)=0,$$

بیان نمود به‌طوری‌که $K=\ell+D-3/2$ و ℓ مبین عدد کوانتومی اندازه‌حرکت زاویه‌ای است که با فرض $S(r)=V(r)=V_{MHt}(r)$ رابطه

$$\left(\hbar^2c^2\frac{d^2}{dr^2}+\left(E_{n,\ell}^2-\mu^2c^4\right)-2V_{MHt}(r)\left(\mu c^2+E_{n,\ell}\right)-\frac{K(K+1)\hbar^2c^2}{r^2}\right)U_{n,\ell}(r)=0,$$

قابل حصول است. معادله شعاعی کلاین- گوردون D–بعدی در حضور پتانسیل شیوبرگ برای حالت‌های غیر صفر اندازه حرکت زاویه‌ای به فرم

$$\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{E_{n,\ell}^2-\mu^2c^4}{\hbar^2c^2}+\frac{2\left(E_{n,\ell}+\mu c^2\right)}{\hbar^2c^2}\left(\frac{2S}{\left(e^{2\varsigma r}-1\right)^2}\cdot\right.\right.$$

$$\left.\left.\left((\upsilon-1)e^{2\varsigma r}+\upsilon+1\right)^2\right)-\frac{K(K+1)\hbar^2c^2}{r^2}\right)U_{n,\ell}(r)=0,\qquad(۵)$$

بیان گردیده به‌طوری‌که $K=\ell+D-3/2$ است. جهت استفاده از رهیافت نیکیفوروف-یووارف [۹]، تغییر متغیری به‌صورت $\xi=e^{-2\varsigma r}$ اعمال کرده و با بهره‌گیری از تقریب گرین- آلدریش، فرم معادله فوق هندسی تعمیم یافته به صورت

$$\left[\frac{d^2}{d\xi^2}+\frac{1}{\xi}\frac{d}{d\xi}+\frac{1}{\xi^2(1-\xi)^2}\left(-\chi_1\xi^2+\chi_2\xi-\chi_3\right)\right]\Upsilon_{n,\ell}(\xi)=0$$

بدست می‌آید به‌طوری‌که

$$\chi_1=\frac{1}{2\varsigma^2c^2\hbar^2}\left((\upsilon+1)^2S+\frac{c^2\mu-E_{n,\ell}}{2}\right.$$

$$\left.\left(c^2\mu+E_{n,\ell}\right),\ \chi_2=\frac{1}{2\upsilon^2c^2\hbar^2}\left(c^4\mu^2+\left(-2K\hbar^2\right.\right.\right.$$

$$\left.\left.\left.(K+1)\upsilon^2-2\mu S\left(\upsilon^2-1\right)\right)c^2-2E_{n,\ell}\left(S\left(\upsilon^2-1\right)\right.\right.\right.$$

$$\left.\left.\left.2C\upsilon+\frac{E_{n,\ell}}{2}\right)\right)\right),$$

$$\chi_3=\frac{1}{2\kappa^2c^2\hbar^2}\left(\frac{c^2\mu-E_{n,\ell}}{2}-C\right)\left(c^2\mu+E_{n,\ell}\right)$$

طیف انرژی مربوط به معادله کلاین - گوردون در حضور پتانسیل مفروض به فرم

$$\frac{1}{2c^2\hbar^2\varsigma^2}\left(\left(\sqrt{c^2\mu+E_{n,\ell}}\left(2(\upsilon-1)^2S+c^2\mu\right.\right.\right.$$

$$\left.\left.\left.-E_{n,\ell}\right)^{\frac{1}{2}}+2\varsigma\left(n+\frac{1}{2}\right)c\hbar\right)\left(4\left(K+\frac{1}{2}\right)\hbar^2c^2\cdot\right.\right.$$

$$\left.\left.\varsigma^2+8\upsilon^2\left(c^2\mu+E_{n,\ell}\right)S\right)^{\frac{1}{2}}+2\varsigma\left(n+\frac{1}{2}\right)c\cdot\right.$$

$$\left.\sqrt{c^2\mu+E_{n,\ell}}\hbar\sqrt{2(\upsilon-1)^2S+c^2\mu-E_{n,\ell}}\right.$$

$$+\left(2\left(K^2+n^2+K+n+\frac{1}{2}\right)\hbar^2\varsigma^2+4S\mu\cdot\right.$$

$$\left.\upsilon(\upsilon-1)\right)c^2+4E_{n,\ell}S\upsilon(\upsilon-1)\Big)=0\qquad(۶)$$

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

در ادامه تابع موج متناظر با این سامانه را می‌توان به فرم

$$U_n(\xi)=\aleph_n \xi^{\alpha}(1-\xi)^{\beta} P_n^{(2\alpha,2\beta-1)}(1-2\xi)$$

بدست آورد به‌طوری‌که $P_n^{(a,b)}$ معرف چندجمله‌ای ژاکوبی بوده و

$$\alpha=\frac{\left(\left(\mu c^2-E_{n,\ell}+2(\upsilon-1)^2 S\right)\left(\mu c^2+E_{n,\ell}\right)\right)^{1/2}}{2c\hbar\varsigma},$$

$$\beta=\frac{1}{2c\hbar\kappa}\Big(c\hbar\varsigma+\Big(\Big(4\Big(\mathrm{K}+\frac{1}{2}\Big)^2\hbar^2\Big)c^2\varsigma^2$$

$$+8\upsilon^2\left(\mu c^2+E_{n,\ell}\right)S\Big)^{\frac{1}{2}}$$

است. با استفاده از خاصیت تعامد چندجمله‌ای‌های ژاکوبی [۱۰]، می‌توان ضریب بنجارش $\aleph_n$ را به صورت

$$\aleph_n=\left(\frac{\alpha\varsigma(\beta+n+\alpha)\Gamma(n+1)\Gamma(\beta+n+2\alpha-1)}{(n+\beta)\Gamma(n+2\beta)}\right)^{1/2}$$

بیان نمود. پاسخ‌های معادله شرودینگر را می توان به طور مستقیم از حل معادله نسبیتی کلاین-گوردون با انجام برخی تبدیلات بدست آورد. بنابراین، با استفاده از نگاشت

$$\mu c^2+E_{n,\ell}\to 2\mu c^2,\quad E_{n,\ell}-\mu c^2\to E_{n,\ell}^{N.R.}$$

در محدوده غیرنسبیتی، به‌طوری‌که $\varsigma\prec 1$ و $0\le\upsilon\le 1$ است، طیف انرژی غیرنسبیتی D-بعدی متناظر با پتانسیل رابطه ۱، به فرم

$$E_{n,\ell}^{N.R.}=-2\Big(\hbar^2\Big(\mathrm{K}(\mathrm{K}+1)+n(n+1)+\frac{1}{2}\Big)\cdot$$

$$\varsigma^2+\Big(\Big(n+\frac{1}{2}\Big)\hbar\Big((4\Big(\mathrm{K}+\frac{1}{2}\Big)^2\hbar^2\varsigma^2$$

$$+16\upsilon^2 S\mu\Big)^{\frac{1}{2}}\Big)\varsigma+4\upsilon\mu S(\upsilon-1)^2\Big)\cdot\Big((\hbar\varsigma(2n$$

$$+1)+\Big(4\Big(\mathrm{K}+\frac{1}{2}\Big)^2\hbar^2\varsigma^2+16\upsilon^2 S\mu\Big)^{\frac{1}{2}}\mu\Big)^{-1}$$

$$+2\left((\upsilon-1)^2 S\right)$$

حاصل می‌گردد.

نتیجه‌گیری

در این تحقیق، معادله کلاین- گوردون در حضور پتانسیل شیوبرگ و با بهره‌گیری از تقریب گرین- آلدریش به کمک روش نیکیفوروف- یووارف به صورت تحلیلی مطالعه گردیده و طیف انرژی متناظر برای حالات غیر صفر اندازه حرکت زاویه‌ای مورد بررسی قرار گرفته است. می‌توان نتیجه گرفت که انرژی $E_{n,\ell}$ سامانه با افزایش پارامتر شدت جفت‌شدگی S به‌طور یکنواخت کاهش می‌یابد. همانطور که از رابطه ۶ می‌توان استنباط کرد، با افزایش پارامتر پوششی ς، انرژی سامانه به‌طور منفی افزایش یافته که مبین آن است که در سطوح انرژی بالاتر و نیز در ابعاد بالاتر سامانه رفتاری جاذب از خود نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که روش نیکیفوروف- یووارف، رهیافتی کاربردی و موثّر در حل معادلات پیچیده در چارچوب مکانیک کوانتومی ارائه می‌دهد.

مرجع‌ها

[1] M. H. Pacheco, R. V. Maluf, C. A. S. Almeida, and R. R. Landim, *EPL* **108** (2014) 10005.
[2] A. Boumali, *EJTP* **12** (2015) 121.
[3] R. L. Greene and C. Aldrich, *Phys. Rev. A* **14** (1976) 2363.
[4] H. J. De Vega, *Int. J. Mod. Phys. A* **4** (1989) 2371-2463.
[5] A. Algin, M. Arik and A. S. Arikan, *Phys. Rev. E* **65** (2002) 026140.
[6] A. Ballesteros, O. Civitarese and M. Reboiro, *Phys. Rev. C* **68** (2003) 044307.
[7] Y. Sun, S. He and C. -S. Jia, *Phys. Scr*, **87** (2013) 025301.
[8] D. Schiöberg, *Mol. Phys.* **25** (1986) 1123-1137.
[9] G. Szego, *"Orthogonal Polynomials"*, American Mathematical Society, New York, (1959).
[10] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *'Table of Integrals, Series and Products"*, Academic Press, New York, (1965).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی حساسیت توابع توزیع پارتونی انتگرال‌گیری نشده روش کیمبر-مارتین-ریسکین نسبت به توابع توزیع پارتونی ورودی

بدیعیان باغ‌سیاهی، زهرا؛ مدرس، مجید؛ کرد والش آبادی، رامین

دانشکده فیزیک دانشگاه تهران ، انتهای خیابان کارگر شمالی ، تهران

چکیده

در این گزارش به بررسی (۱) نسبت توابع توزیع پارتونی انتگرال‌گیری نشده (یو.پی.دی.اف) کیمبر.مارتین. ریسکین بر حسب Q^2، پرداخته‌ایم تا حساسیت یو.پی.دی.اف‌های کی.ام.آر را نسبت به توابع توزیع پارتونی (پی.دی.اف) ورودی بررسی کنیم. نشان داده می‌شود که اختلاف زیادی بین یو.پی.دی.اف‌های کی.ام.آر وجود ندارد. (۲) سپس وابستگی تابع ساختار پروتون در چهارچوب فاکتورگیری تکانه‌عرضی به مجموعه یو.پی.دی.اف‌های مختلف ارائه می‌شود. نتایج با داده‌های آزمایشگاهی ان.ام.سی، زئوس و اچ۱+زئوس در دو مقیاس $Q^2 = 27 , 90\ GeV^2$ مقایسه می‌شوند. این توابع ساختار رفتار مشابهی از خود نشان می‌دهند.

The investigation of sensibility unintegrated parton distribution functions of Kimber-Martin-Ryskin with respect to the input parton distribution functions

Badieian Baghsiyahi, Zahra; Modarres, majid; Kord Valeshabadi, Ramin

Department of Physics, University of Tehran, Tehran

Abstract

In this work, we discuss: (i) The ratios of Kimber-Martin-Ryskin (KMR) unintegrated parton distribution functions (UPDFs)sets versus the hard scale Q2, to find out the sensibility of the KMR UPDFs with respect to the input parton distribution functions (PDFs) sets. It is shown that there is not much difference between the different KMR UPDFs sets ratios. (ii) Then, the dependence of proton k_t-factorization structure Functions(SF) on the different UPDFs sets are presented. The results are compared with the experimental data of NMC, ZEUS and H1+ZEUS at the hard scale Q^2 = 27 and 90 GeV ^{2}. These SFs have similar behaviours.

PACS No. 10,13

مقدمه

توابع توزیع پارتونی(پی.دی.اف) از عناصر اصلی در درک ساختار هادرون‌ها هستند. این توابع را از داده‌های تجربی در چهارچوب هم‌راستا به‌دست می‌آوریم. در این چهارچوب فرض می‌کنیم تکانه عرضی بسیار کوچک و قابل چشم‌پوشی است. در انرژی‌های بالا و x کوچک (کسر تکانه طولی پارتون نسبت به پروتون) که تکانه عرضی پارتون مهم می‌شود، نیاز به دانستن توابع توزیع پارتونی انتگرال‌گیری نشده (یو.پی.دی.اف) داریم که برپایه معادلات دی گلپ (DGLAP) هستند. این توابع از توابع توزیع پارتونی (پی.دی.اف) به عنوان ورودی استفاده می‌کنند و با استفاده از روش‌های مختلفی مانند کیمبر-مارتین-ریسکین[۱] و پارتون برنچینگ[۲] به دست می‌آیند.

هدف از انجام این پژوهش بررسی حساسیت یو.پی.دی.اف‌های کی.ام.آر به مجموعه پی.دی.اف‌های مختلف ورودی است. به‌همین دلیل بعد از نسبت یو.پی.دی.اف‌ها، تابع ساختار پروتون در چهارچوب فاکتورگیری تکانه عرضی را با استفاده از روش کی.ام.آر برای مجموعه‌های مختلف یو.پی.دی.اف به دست می‌آوریم

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تا ببینیم کدام مجموعه پی.دی.اف نتایج بهتری نسبت به داده‌های آزمایشگاهی موجود می‌دهد[۳].

ساختار مقاله بدین صورت است که ابتدا به تئوری گزارش می‌پردازیم. سپس نمودارها و نتایج آورده می‌شود و در نهایت نتیجه‌گیری را ارئه می‌دهیم.

تئوری

با استفاده از معادلات دی گلپ و شرط ترتیب بندی زاویه‌ای (AOC)[۴]، برای یو.پی.دی.اف‌های کی.ام.آر کوارکی داریم:

$$f_q(x,k_t^2,\mu^2) = T_q(k_t,\mu)\frac{\alpha_s(k_t^2)}{2\pi} \times \int_x^{z_{max}} dz[P_{qq}(z)\frac{x}{z}q(\frac{x}{z},k_t^2) + P_{qg}(z)\frac{x}{z}g(\frac{x}{z},k_t^2)] \quad (۱)$$

و یو.پی.دی.اف‌های کی.ام.آر گلئونی :

$$f_g(x,k_t^2,\mu^2) = T_g(k_t,\mu)\frac{\alpha_s(k_t^2)}{2\pi} \times \int_x^{z_{max}} dz[\sum_q P_{gq}(z)\frac{x}{z}q(\frac{x}{z},k_t^2) + P_{gg}(z)\frac{x}{z}g(\frac{x}{z},k_t^2)] \quad (۲)$$

بدین‌صورت‌است، که $P_{ab}(z)$ توابع شکاف، $a(x/z,k_t^2)$ توابع توزیع پارتونی و $T_a(k_t,\mu)$ سوداکوف فرم فاکتورها هستند.(a وb کوارک و گلئون هستند.) و $z_{max}=\mu/(\mu+k_t)$

تابع ساختار پروتون در چهارچوب فاکتورگیری تکانه عرضی، در ناحیه اختلالی:

$$F_2^{g\to\bar{q}q}(x,Q^2) = \sum_q e_q^2\frac{Q^2}{4\pi}\int\frac{dk_t^2}{k_t^4}\int d\beta\int d^2\kappa_t\alpha_s(\mu^2) f_g(\frac{x}{z},k_t^2,\mu^2)\Theta(1-\frac{x}{z})\times\{[\beta^2+(1-\beta^2)](\frac{\kappa_t}{D_1}-\frac{(\kappa_t-k_t)}{D_2})^2 + [m_q^2+4Q^2\beta^2(1-\beta)^2](\frac{1}{D_1}-\frac{1}{D_2})^2\}, \quad (۳)$$

که:

$$D_1 = \kappa_t^2+\beta(1-\beta)Q^2+m_q^2$$
$$D_2 = (\kappa_t-k_t)^2+\beta(1-\beta)Q^2+m_q^2$$
$$\frac{1}{z} = 1+\frac{\kappa_t^2+m_q^2}{(1-\beta)Q^2}+\frac{k_t^2+\kappa_t^2-2k_t.\kappa_t+m_q^2}{\beta Q^2}$$

$$F_2^{qq}(x,Q^2) = \sum_q e_q^2\int_{k_0^2}^{Q^2}\frac{d\kappa_t^2}{\kappa_t^2}\frac{\alpha_s(\kappa_t^2)}{2\pi}\int_{k_0^2}^{\kappa_t^2}\frac{dk_t^2}{k_t^2}\int_x^{\frac{Q}{(Q+k_t)}}dz [f_q(\frac{x}{z},k_t^2,Q^2)+f_{\bar{q}}(\frac{x}{z},k_t^2,Q^2)]P_{qq}(z) \quad (۴)$$

و در ناحیه غیراختلالی :

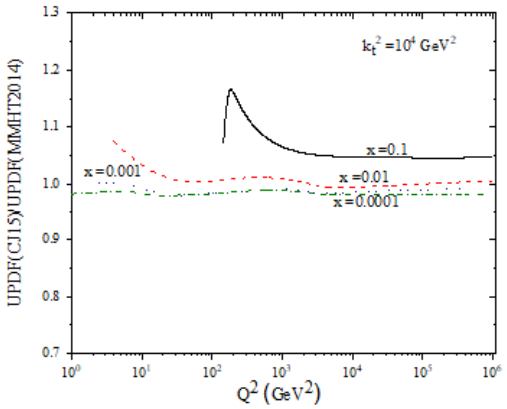
$$F_2^{g\to\bar{q}q}(x,Q^2) = \int_0^{k_0^2}\frac{dk_t^2}{k_t^2}f_g(x,k_t^2,\mu^2)[\frac{re\min der}{k_t^2}] \quad (۵)$$
$$\approx xg(x,k_0^2)T_g(k_0,\mu)[]_{k_t=a},$$

$$F_2^{qq}(x,Q^2) = \sum_q e_q^2[(xq(x,k_0^2)+x\bar{q}(x,k_0^2)]T_q(k_0,Q) \quad (۶)$$

می‌باشند که تابع ساختار کل در چهارچوب فاکتورگیری تکانه عرضی را از جمع معادلات ۳ تا ٦ به دست می‌آوریم[۵] (در این معادلات k_0 =1 GeV، جرم کوارک‌های سبک را صفر در نظر گرفته و m_c =1.4GeV ، a نیز عددی بین صفر و k_0 است.).

نمودارها و نتایج

برای بررسی اثر یو.پی.دی.اف‌های کی.ام.آر با تغییر در مجموعه پی.دی.اف‌های ورودی، نسبت یو.پی.دی.اف‌های کوارک بالا را به یو.پی.دی.اف‌های با مجموعه پی.دی.اف ام.ام.اچ.تی۲۰۱٤ به عنوان ورودی برای کسر تکانه‌های x =10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4} به ازای تکانه عرضی $k_t^2 = 10^4$ GeV^2 بر حسب مقیاس سخت Q^2 در شکل های ۱ تا ۳ رسم می‌کنیم که پی.دی.اف‌ها از کتابخانه ال.اچ.ای.پی.دی.اف[٦] (LHAPDF) انتخاب شده‌اند.

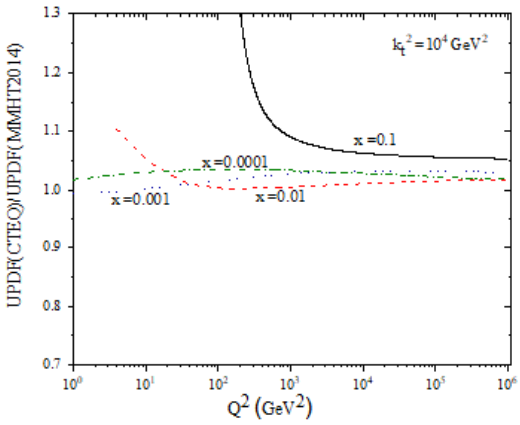


شکل ۱- نسبت یو.پی.دی.اف سی.جی۱۵به یو.پی.دی.اف ام.ام.اچ.تی۲۰۱٤برای مقادیر مختلف x در k_t^2 =10^4 GeV^2

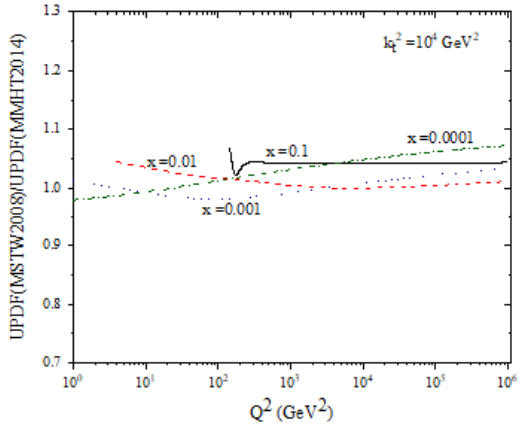
در x بزرگ نواحی پرشیب و واگرایی مشاهده می‌کنیم. وقتی حد پایین و بالای انتگرال‌ها در یو.پی.دی.اف‌ها به یکدیگر نزدیک می‌شود یو.پی.دی.اف‌ها به سمت صفر میل می‌کنند و با توجه به اینکه

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

کدام یو.پی.دی.اف زودتر به صفر میل می‌کند نسبت یو.پی.دی.اف به صفر یا بی‌نهایت میل می‌کند. این رفتار به تعریف z_{max} مربوط می‌شود. هر چه k_t^2 بزرگتر باشد $x \to z_{max}$ در مقیاس بزرگتری رخ می‌دهد و محدوده مقیاسی (μ) که در یک تکانه عرضی



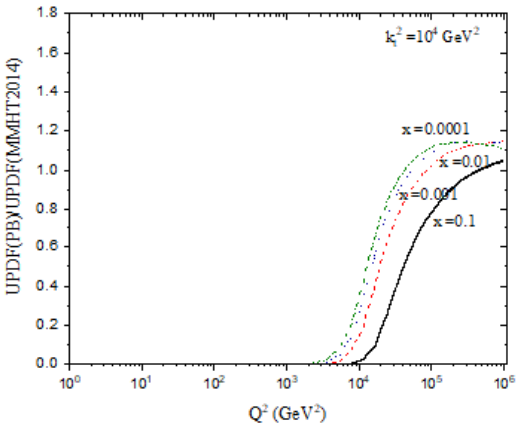
شکل ۲- نسبت یو.پی.دی.اف سی.تی.ای.کیو به یو.پی.دی.اف ام.ام.اچ.تی ۲۰۱٤ برای مقادیر مختلف x در $k_t^2 = 10^4$ GeV^2



شکل ۳- نسبت یو.پی.دی.اف ام.اس.تی.دبلیو۲۰۰۸ به یو.پی.دی.اف ام.ام.اچ.تی ۲۰۱٤ برای مقادیر مختلف x در $k_t^2 = 10^4$ GeV^2

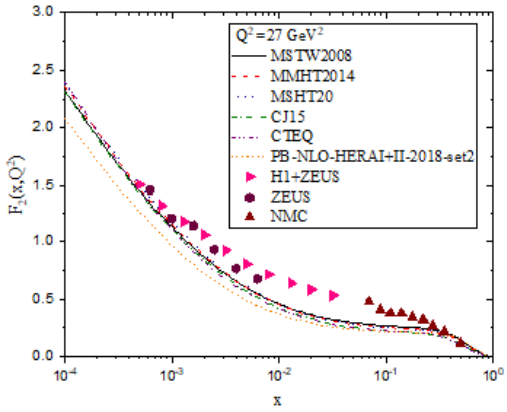
خاص این اتفاق روی می‌دهد را با برابر قرار دادن x و z_{max} به دست می‌آوریم[۷].

برای بررسی و مطالعه دقیق‌تر این موضوع که مجموعه پی.دی.اف‌های‌مختلف چه تاثیری بر یو.پی.دی.اف‌ها دارند، به سراغ محاسبه تابع ساختار پروتون با استفاده از یو.پی.دی.اف‌های کی.ام.آر در چارچوب فاکتورگیری تکانه عرضی می‌رویم و نتایج



شکل ٤- نسبت یو.پی.دی.اف پارتون برنچینگ به یو.پی.دی.اف ام.ام.اچ.تی ۲۰۱٤ برای مقادیر مختلف x در $k_t^2 = 10^4$ GeV^2

را با داده‌های آزمایشگاهی ان.ام.سی، زئوس و اچ۱+زئوس مقایسه می‌کنیم. همانطور که انتظار داریم نتایج با داده‌ها در مقیاس بزرگ‌تر $Q^2 = 90$ GeV^2، توافق بهتری دارند و نتایج به مجموعه پی.دی.اف انتخابی وابسته نیست. در ضمن تابع ساختار را نیز با استفاده از یو.پی.دی.اف پارتون‌برنچینگ هم به دست می‌آوریم.

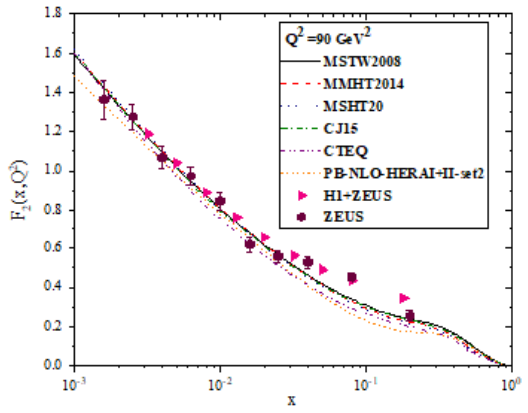


شکل ۵- مقایسه تابع ساختار پروتون برای مجموعه پی.دی.اف‌های مختلف با داده‌های آزمایشگاهی در $Q^2 = 27$ GeV^2

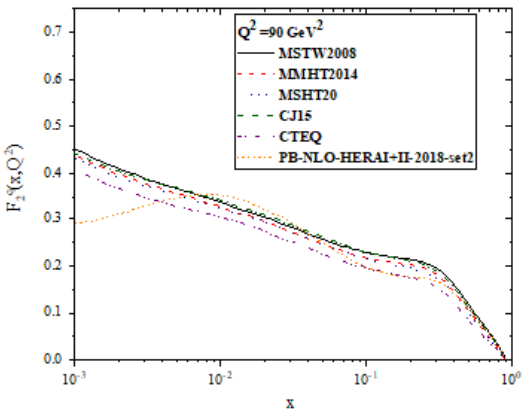
جهت بررسی دقیق‌تر، سهم کوارکی وگلئونی تابع ساختار را جداگانه برای مقیاس $Q^2 = 90$ GeV^2، به‌دست می‌آوریم. سهم عمده تابع ساختار در x کوچک مربوط به سهم گلئونی می‌شود و باز هم تفاوتی بین مجموعه پی.دی.اف‌های مختلف وجود ندارد. در حالیکه سهم گلئونی تابع ساختار با استفاده از روش پارتون

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

برنچینگ بزرگتر از سهم گلئونی تابع ساختار روش کی.ام.آر شده-است، سهم کوارکی تابع ساختار کوچک‌تر است.



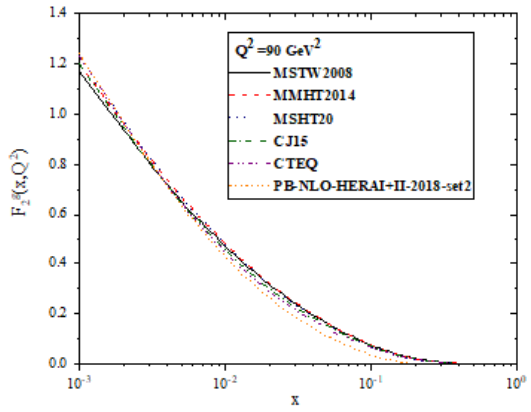
شکل ٦- مقایسه تابع ساختار پروتون برای مجموعه پی.دی.اف‌های مختلف با داده‌های آزمایشگاهی در Q^2 =90 GeV^2



شکل ۷- سهم کوارکی تابع ساختار برای مجموعه پی.دی.اف‌های مختلف در Q^2 =90 GeV^2

نتیجه‌گیری

شکل‌های ۱ تا ۳ نشان می‌دهد که یو.پی.دی.اف‌های کی.ام.آر نسبت به مجموعه پی.دی.اف ورودی تقریبا مشابه و پایدار است اما یو.پی.دی.اف پارتون‌برنچینگ نسبت به یو.پی.دی.اف کی.ام.آر با مجموعه پی.دی.اف ام.ام.اچ.تی۲۰۱٤ تفاوت قابل توجهی دارد (شکل ٤).



شکل ۸- سهم گلئونی تابع ساختار برای مجموعه پی.دی.اف‌های مختلف در Q^2 =90 GeV^2

برای بررسی دقیق‌تر، به محاسبه تابع ساختار پروتون در چهارچوب فاکتورگیری تکانه عرضی با مجموعه پی.دی.اف‌های مختلف پرداختیم و با داده‌های آزمایشگاهی مقایسه کردیم. نشان داده شد که تابع ساختار نیز وابسته به مجموعه پی.دی.اف انتخابی نیست (شکل‌های ۵و٦) و در مقیاس بالاتر توافق بیشتری با داده‌های آزمایشگاهی دارد. اما سهم کوارکی وگلئونی تابع ساختار با استفاده از روش پارتون برنچینگ رفتار متفاوتی دارد (شکل‌های۷و۸).

مرجع‌ها

[۱] M. A. Kimber, A. D. Martin, M. G. Ryskin, *Phys. Rev. D* **63** (2001), 114027.
[۲] A. Bermudez Martinez, P. Connor, H. Jung, A. Lelek, and R. Zlebcik, *Phys. Rev. D* **99** (2019), 074008.
[۳] Z. Badieian Baghsiyahi, M. Modarres and R. Kord V aleshabadi, *Eur. Phys. J. C* **82** (2022), 392.
[٤] H. Hosseinkhani and M. Modarres, *Phys. Lett. B* **694** (2011), 355.
[٥] M. Modarres, H. Hosseinkhani and N. Olanj, *Phys. Rev. D* **89** (2014), 034015.
[٦] A. Buckley, J. Ferrando and et al., *Eur. Phys. J. C* **75** (2015), 132.
[۷] M. Modarres and H. Hosseinkhani, *Few-Body Syst.* **47** (2010), 237.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تابع ساختار غیرقطبیده‌ی نوکلئونی در نظریه‌ی اختلالی تحلیلی

قاسم زاده ، لیلا [۱] ؛ میرجلیلی ، ابوالفضل [۱] ؛ آتشبار تهرانی ، شاهین [۲]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه یزد ، صفائیه ، یزد

[۲] پژوهشگاه دانش‌های بنیادی(IPM) ،پژوهشکده ذرات و شتابگرها، تهران

چکیده

نظریه‌ی کوانتوم دینامیک رنگ اختلالی (pQCD) در انرژِهای بالا و متوسط به خوبی قادر به توصیف کمیت‌های فیزیکی است اما این نظریه در حد انرژی $Q^2 \simeq \Lambda^2$ و انرژی‌های پایین‌تر از آن، به دلیل وجود واگرایی مادون قرمز در ثابت جفت‌شدگی رونده نتایج قابل اتکایی ندارد. برای رهایی از این مشکل در این مقاله به رهیافت اختلالی تحلیلی تحت عنوان anQCD روی می‌آوریم که با بهره‌مندی از چهار مدل برای آن می‌توان در انرژی‌های مذکور نتایج محدود و معینی برای کمیت‌های فیزیکی وابسته به ثابت جفت‌شدگی محاسبه کرد. در اینجا بطور خاص نظریه تحلیلی جرمدار را بکار برده و با استفاده از آن تابع ساختار غیرقطبیده‌ی نوکلئونی و همچنین قاعده‌ی جمع گاتفرید را محاسبه خواهیم کرد. نتایج بدست آمده با داده های تجربی در حد انرژی های پایین مطابقت خوبی دارد.

واژه های کلیدی: واگرایی مادون قرمز، ثابت جفت‌شدگی رونده، تابع ساختار نوکلئونی، رهیافت anQCD

Unpolarized nucleon structure function in analytical perturbation theory

Ghasemzadeh, Leila [1]; Mirjalili, Abolfazl [1]; Atashbar Tehrani, Shahin [2]

[1] *Department of Physics, Yazd University , Yazd*
[2] *School of Particles and Accelerators, Institute for Research in Fundamental Sciences (IPM),Tehran*

Abstract

At high and middle energies, the perturbative Quantum Choromo Dynamics is completely able to describe the physical observables. But at the energy scale $Q^2 \simeq \Lambda^2$ and lower than Λ, it does not have reliable results, due to the IR singularity, embedded in running coupling constant. To avoide this problem, we turn, in this paper, to an analytic approach named anQCD in which using four model related to it, it is possible to calculate definite values for physical quantities which are dependent on coupling constant. Here we employ a special model that is called massive analytic theory. Using it we compute un-polarized nucleon structure function and Gottfried sum rule. The results at low energy scales are in good agreement with experimental data.

Keywords: *IR singularity, running coupling constant, nucleon structure function, anQCD approach*

PACS No. 13

مقدمه

استفاده از آنالیز QCD برای داده‌های حاصل از پراکندگی ناکشسان عمیق دانش قابل اتکایی از فیزیک هادرون را در مقیاس بالای انرژی ($Q^2 \gg 1GeV^2$) در اختیار قرار می‌دهد اما در انرژی‌های کم ($Q^2 \leq 1GeV^2$) نظریه‌ی QCD اختلالی متعارف نتایج اطمینان بخشی ندارد. به این دلیل که ثابت جفت‌شدگی رونده‌ی QCD، ، با کاهش انرژی رشد کرده و با واگرایی مادون قرمز مواجه خواهیم شد. برای رفع این تکینگی روش‌های مختلفی پیشنهاد شده که یکی از آن‌ها نظریه‌ی اختلالی تحلیلی است که با تغییر مقیاس از $a_s^2(Q^2)$ به $A(Q^2)$ تکینگی Λ را هموار می‌کند. این رهیافت چهار مدل ارائه می‌دهد که عبارتند از FAPT، $2\delta anQCD$، $3\delta anQCD$ و MPT . هریک از این مدل‌ها در جایگاه خود به بهبود نتایج کمک می‌کنند. ما در این

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مقاله با استفاده از مدل MPT تحت عنوان نظریه اختلای جرمدار به محاسبه‌ی تابع ساختار غیرقطبیده‌ی نوکلئونی و قاعده‌ی جمع گاتفرید می‌پردازیم و با مقایسه‌ی آن‌چه حاصل می‌شود با نتایج نظریه‌ی pQCD متعارف و همچنین داده‌های تجربی در دسترس تاثیر رهیافت اختلالی تحلیلی را بر محاسبات نمایش می‌دهیم.

مفاهیم پایه در نظریه‌ی اختلالی تحلیلی

مهم‌ترین عنصر این نظریه ثابت جفت‌شدگی تحلیلی مرتبه اول است که با اعمال قضیه‌ی کوشی بر ثابت جفت‌شدگی رونده‌ی می‌توان رابطه‌ی زیر را برای آن نوشت[1,2]:

$$A_1(Q^2)=\frac{1}{\pi}\int_{\sigma=M_{th}^2}^{\infty}\frac{d\sigma\rho_1(\sigma)}{(\sigma+Q^2)}$$

(۱)

به‌طوری که

$$\rho_1(\sigma)\equiv \mathrm{Im}A_1(\sigma-i\varepsilon)$$

(۲)

A_ν از جبر استاندارد پیروی نمی‌کند، به عبارت دیگر $A_\nu A\mu\neq A_{\nu\mu}$ یا $A_{\nu+\mu}\neq A_\nu^\mu$. برای داشتن این ثابت جفت‌شدگی در مرتبه‌ی n به مشتق لگاریتمی آن، $\tilde{A}_n$، نیاز داریم که برحسب A_1 تعریف می‌شود[1]:

$$\tilde{A}_{n+1}\equiv\frac{(-1)^n}{\beta_0^n n!}(\frac{\partial}{\partial\ln Q^2})^n A_1(Q^2)$$

(۳)

برای $n=0$ تساوی $A_1\equiv\tilde{A}_1$ برقرار است. در این رابطه $\beta_0=\frac{1}{4}(1-\frac{2}{3}N_f)$ اولین ضریب بسط در تابع بتای QCD است. با جای‌گذاری (۱) در (۳) برای مرتبه‌ی $n+1$ ام خواهیم داشت:

$$\tilde{A}_{n+1}(Q^2)=\frac{1}{\pi}\frac{(-1)}{\beta_0^n\Gamma(n+1)}\int_0^\infty\frac{d\sigma}{\sigma}\rho_1(\sigma)Li_{-n}(-\frac{\sigma}{Q^2})$$

(٤)

که n شامل مقادیر صحیح می‌شود و این درحالی است که برای مقادیر غیرصحیح ν داریم:

$$\tilde{A}_{\nu+1}(Q^2)=\frac{1}{\pi}\frac{(-1)}{\beta_0^\nu\Gamma(\nu+1)}\int_0^\infty\frac{d\sigma}{\sigma}\rho_1(\sigma)Li_{-\nu}(-\frac{\sigma}{Q^2})$$

(٤)

به‌طوری که $Li_{-\nu}(-\frac{\sigma}{Q^2})$ تابع چند لگاریتمی است و برای σهای کوچک و $\nu>-1$ تقریب $Li_{-\nu}(-z)\sim\ln^{-\nu}z$ برای آن برقرار است. درنهایت ثابت جفت‌شدگی تحلیلی، $A_\nu(Q^2)$، را می‌توان برحسب مشتق لگاریتمی آن نوشت:

$$A_\nu(Q^2)=\tilde{A}_\nu+\sum_{m\geq1}\tilde{k}_m(\nu)\tilde{A}_{\nu+m}$$

(٦)

که ضرایب $\tilde{k}_m$ در [2] به‌دست آمده است. از مدل تحلیلی MPT بهره می‌بریم که با توجه به اهمیت نقش گلئون در تابع ساختار یکتا مناسب‌ترین روش می‌تواند باشد و تناظر این ثابت جفت‌شدگی با همتای pQCD آن به صورت زیر است:

$$A_1^{(MPT)}(Q^2,N_f)=a(Q^2+m_{gl}^2,N_f)$$

(۷)

که باید $m_{gl}^2>\Lambda^2$ باشد. این جفت‌شدگی تحلیلی، $A_1^{(MPT)}(Q^2)$، در مقادیر بالای انرژی به جفت‌شدگی pQCD متعارف، $a(Q^2)$، میل می‌کند و اختلاف این دو به صورت زیر به‌دست می‌آید:

$$A_1^{(MPT)}(Q^2,N_f)-a(Q^2,N_f)\sim\frac{m_{gl}^2}{Q^2\ln^2(\frac{Q^2}{\Lambda^2})}$$

(۸)

چگالی پارتونی و چندجمله‌ای‌های ژاکوبی

برای محاسبه‌ی تابع ساختار نوکلئونی نخستین قدم به‌دست آوردن معادله تحول پارتونی است با حل معادله DGLAP در فضای x. اما در این فضا محاسبات دشوار است بنابراین با استفاده از تبدیل ملین[3] معادلات تحول پارتونی را در فضای ممان می‌نویسیم، به‌طوری‌که برای حالت یکتا داریم [3]

$$\begin{pmatrix}\Sigma\\ g\end{pmatrix}_{NLO}=\{(\frac{a_s}{a_0})^{-r_-}[e_-+(a_0-a_s)e_-R_1e_-$$

$$-(a_0-a_s(\frac{a_s}{a_0})^{r_--r_+})\frac{e_-R_1e_+}{r_+-r_--1}]+(+\leftrightarrow-)\}\begin{pmatrix}\Sigma_0\\ g_0\end{pmatrix}$$

(۹)

و در حالت غیریکتا رابطه زیر را برای تحول ممان ها داریم [3]:

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$$q_{NLO}^{\pm,v}(a_s)=[1+R_1^{\pm,v}(a_0-a_1)](\frac{a_s}{a_0})^{-R_0^{\pm,v}}\times q^{\pm,v}(a_0)$$

(۱۰)

در این روابط ماتریس‌های R_n، $e_\pm$ و $r_\pm$ در [4] برحسب توابع شکافت معرفی شدند. با استفاده از چگالی‌های پارتونی به‌دست آمده از (۹) و (۱۰) می‌توانیم تابع ساختار نوکلئونی را به شکل زیر بنویسیم:

$$F_2(N,Q^2)=[C_{2q}^{(0)}(N)+a_s(Q^2)C_{2q}^{(1)}(N)]$$
$$\times\sum_{i=u,d,s}e_i^2q_i(N,Q^2)+a_s(Q^2)C_{2g}^{(1)}(N)\frac{1}{f}\sum_{i=u,d,s}e_i^2g(N,Q^2)$$

(۱۱)

به‌طوری که $C^k(N)$ها ضرایب ویلسون هستند و در [4] محاسبه شده‌اند. در ادامه با استفاده از چندجمله‌ای‌های ژاکوبی می‌توانیم تابع ساختار به‌دست آمده در فضای ممان ملین را به فضای x بیورکن بازگردانیم، به این ترتیب[5]:

$$F_2(x,Q^2)=x^\beta(1-x)^\alpha\sum_{n=0}^{\infty}a_n^{\alpha,\beta}(Q^2)\Theta_n^{(\alpha,\beta)}(x)$$

(۱۲)

که $a_n^{\alpha,\beta}$ ضریب بسط است و $\Theta_n^{(\alpha,\beta)}$ چندجمله‌ای‌های ژاکوبی را در خود جای داده است که به ترتیب با روابط زیر بدست می آیند:

$$a_n^{\alpha,\beta}(Q^2)=\int_0^1F_2(x,Q^2)\Theta_n^{(\alpha,\beta)}(x)dx$$

$$\Theta_n^{(\alpha,\beta)}(x)=\sum_{k=0}^{n}C_{k,n}^{(\alpha,\beta)}x^k$$

(۱۳)

با ترکیب این دو خواهیم داشت:

$$a_n^{\alpha,\beta}(Q^2)=\int_0^1F_2(x,Q^2)\sum_{j=0}^{n}C_{j,n}^{(\alpha,\beta)}x^j dx$$

(۱۴)

با جای‌گذاری رابطه‌ی (۱۴) در (۱۲) و با استفاده از ممان تابع ساختار، $M_{F_2}(n,Q^2)$، به شکل نهایی تابع ساختار در فضای بیورکن می‌رسیم:

$$F_2(x,Q^2)=x^\beta(1-x)^\alpha\sum_{n=0}^{N_{Max}}\Theta_n^{(\alpha,\beta)}(x)\sum_{j=0}^{n}C_{j,n}^{(\alpha,\beta)}M_{F_2}(j+2,Q^2)$$

(۱۵)

اکنون با برازش داده‌های در دسترس می‌توان α و β را برحسب Q^2 نوشت به‌طوری که :

$$\alpha=-465.737+553.089Exp(Q^2)+\frac{336.376}{\ln(Q^2)}$$

$$\beta=11.1583+\frac{7.67075Q^2}{\ln(Q^2)}+14.3084\sqrt{Q^2}\ln(Q^2)$$

(۱۶)

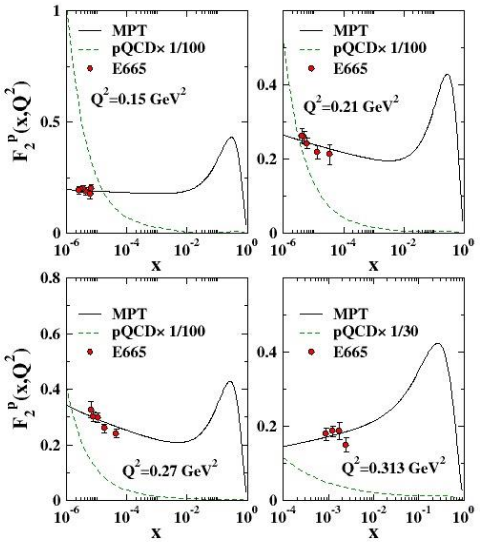
برای تکمیل محاسبات به چگالی‌های پارتونی اولیه نیازمندیم که به صورت زیر پارامتربندی شده‌اند[6]:

$$xu_v(x,Q_0^2)=N_u x^{a_u}(1-x)^{b_u}(1+A_u\sqrt{x}+B_u x+C_u x^2)$$
$$xd_v(x,Q_0^2)=N_d x^{a_d}(1-x)^{b_d}(1+A_d\sqrt{x}+B_d x+C_d x^2)$$
$$xg(x,Q_0^2)=N_g x^{a_g}(1-x)^{b_g}(1+B_g x^{\alpha_g}(1-x)^{\beta_g})$$
$$x\Sigma(x,Q_0^2)=N_\Sigma x^{a_\Sigma}(1-x)^{b_\Sigma}(1+A_\Sigma\sqrt{x}+B_\Sigma x)$$
$$x\Delta(x,Q_0^2)=N_\Delta x^{a_\Delta}(1-x)^{b_\Delta}(1+A_\Delta\sqrt{x}+B_\Delta x)$$
$$xs(x,Q_0^2)=N_s x^{a_s}(1-x)^{b_s}(1+A_s\sqrt{x}+B_s x)$$

(۱۷)

که پارامترهای مجهول به کمک برازش داده‌ها محاسبه می‌شوند و مقادیر آن‌ها در [6] آمده است.

درانتها با استفاده از دستور مربوط به مدل تحلیلی MPT، $AMPTNl[N_f,\nu,Q^2,m_{gl}^2,\Lambda^2]$، و بکارگیری مقادیر $m_{gl}^2=0.7GeV^2$، $\Lambda^2=0.35GeV^2$ و $N_f=3$ تابع ساختار نوکلئونی در حد انرژی های پایین قابل محاسبه است که در زیر نشان داده شدند:



شکل ۱: تابع ساختار نوکلئونی با کمک مدل MPT در انرژی‌های مختلف

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

قاعده جمع گاتفرید در نظریه‌ی اختلالی تحلیلی

این قانون عدم تقارن طعم‌های سبک کوارکی را در نوکلئون اندازه‌گیری می‌کند[7]:

$$S_G \equiv \int_0^1 \frac{dx}{x}[F_2^p(x,Q^2) - F_2^n(x,Q^2)]$$
$$= \int_0^1 \frac{1}{3}(u(x) - d(x) + \bar{u}(x) - \bar{d}(x))dx$$
$$= \frac{1}{3} - \frac{2}{3}\int_0^1 (\bar{d}(x) - \bar{u}(x))dx \qquad (۱۸)$$

طبق این قاعده اگر در نوکلئون کوارک‌های دربا تقارن داشته باشند و به عبارتی $\bar{u}(x) = \bar{d}(x)$ باشد، مقدار $S_G = \frac{1}{3}$ به‌دست می‌آید. این درحالی است که باتوجه به نتایج تجربی به‌دست آمده از پراکندگی کشسان عمیق لپتون-نوکلئون [8-11] این‌گونه نیست و مقادیر تجربی با $\frac{1}{3}$ اختلاف دارند، به‌طوری که در انرژی $4GeV^2$ مقدار $S_G = 0.235 \pm 0.026$ گزارش شده‌است. این نتیجه می‌تواند به دلیل اثرات غیراختلالی در دریای نوکلئونی باشد که باعث عدم تفارن طعم ($\bar{d}(x,Q^2) > \bar{u}(x,Q^2)$) در محدوده‌ی خاصی از x می‌شود[7]. همچنین مقادیر این کمیت در انرژی‌های مختلف در [11] آمده‌است.در اینجا هدف کاستن اختلاف بین نتایج نظری و تجربی با استفاده از مدل تحلیلی MPT است. در این راه محدوده‌ی پایین انتگرال در رابطه‌ی (۱۸) را 10^{-7} درنظر گرفتیم تا محاسبات سریعتر و با مشگل کمتری انجام شوند. نتایج حاصل از S_G **با استفاده ار مدل MPT** در پنج انرژی مختلف در جدول زیر آمده است:

Q^2 (GeV^2)	S_G
۰/۱۵	۰/۳۲٤۸۹٤
۰/۲۱	۰/۳۱۱٥۳۳
۰/۲۷	۰/۳۰۰٦۱۹
۰/۳۱۳	۰/۲۹۳۹۳۳
٤	۰/۱۹٥۹٦٤

جدول ۱: مقادیر GSR با استفاده از مدل تحلیلی MPT در انرژی‌های مختلف

نتیجه‌گیری

به‌دلیل تکینگی موجود در ثابت جفت‌شدگی pQCD، این نظریه قادر به ارائه‌ی نتایج محدود و قابل اتکا در محدوده انرژی $Q^2 \leq \Lambda^2$ نیست و این دلیلی شد تا به رهیافت اختلالی تحلیلی روی بیاوریم. در اولین قدم تابع ساختار غیرقطبیده‌ی نوکلئونی را به این روش محاسبه نمودیم. با انجام این کار در چند انرژی مختلف مشاهده کردیم که نتایج تحلیلی رفتار ملایم‌تر و قابل قبولی نسبت به نتایج مشابه در pQCD دارد و همچنین با داده‌های آزمایشگاهی در دسترس هم‌خوانی مناسب‌تری دارند. پس از آن به محاسبه فاعده جمع گاتفرید، GSR، با کمک مدل MPTپرداختیم تا بتوانیم نتایج نزدیک‌تری نسبت به مقادیر تجربی به‌دست آوریم و همان‌طور که در جدول (۱) قابل مشاهده است، این مهم به‌دست آمده است.

مرجع‌ها

[1] Ayala, César, and Gorazd Cvetič. "anQCD: a Mathematica package for calculations in general analytic QCD models." *Computer Physics Communications* **190** (2015): 182-199.
[2] Ayala, César, and S. V. Mikhailov. "How to perform a QCD analysis of DIS in analytic perturbation theory." *Physical Review D* **92**, no. 1 (2015): 014028.
[3] Vogt, A. "Efficient evolution of unpolarized and polarized parton distributions with QCD-PEGASUS." *Computer Physics Communications* **170**, no. 1 (2005): 65-92.
[4] Vogt, Andreas, S. Moch, and JAM1109 Vermaseren. "The three-loop splitting functions in QCD: the singlet case." *Nuclear Physics B* **691**, no. 1-2 (2004): 129-181.
[5] Koekoek, J., and Roelof Koekoek. "Differential equations for generalized Jacobi polynomials." *Journal of computational and applied mathematics* **126**, no. 1-2 (2000): 1-31.
[6] Jimenez-Delgado, Pedro, and Ewald Reya. "Delineating parton distributions and the strong coupling." *Physical Review D* **89**, no. 7 (2014): 074049.
[7] Broadhurst, David J., A. L. Kataev, and C. J. Maxwell. "Comparison of the Gottfried and Adler sum rules within the large-Nc expansion." *Physics Letters B* **590**, no. 1-2 (2004): 76-85.
[8] Amaudruz, P., M. Arneodo, A. Arvidson, B. Badelek, Guenter Baum, J. Beaufays, I. G. Bird et al. "Gottfried sum from the ratio F 2 n/F 2 p." *Physical Review Letters* **66**, no. 21 (1991): 2712.
[9] Arneodo, Michele, A. Arvidson, B. Badelek, M. Ballintijn, Guenter Baum, J. Beaufays, I. G. Bird et al. "Reevaluation of the Gottfried sum." *Physical Review D* **50**, no. 1 (1994): R1.
[10] Kabuß, Eva-Maria. "Final results from the NMC." In *AIP Conference Proceedings*, vol. **407**, no. 1, pp. 291-295. American Institute of Physics, 1997.
[11] Abbate, Riccardo, and Stefano Forte. "Re-evaluation of the Gottfried sum using neural networks." *Physical Review D* **72**, no. 11 (2005): 117503.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

حل معادله شرودینگر با استفاده از تبدیل های لاپلاس و ملین در فضای N بعدی در پتانسیل های متفاوت

دیوسار ، محسن ؛ میرجلیلی، ابوالفضل

دانشکده فیزیک دانشگاه یزد ، صفائیه ،یزد

چکیده

با اعمال تبدیل لاپلاس روی معادله شرودینگر در فضای N بعدی، دیده می شود که دارای نقاط تکینه خواهیم بود. با بررسی رفتار معادله در این نقاط می توان به ویژه مقادیر جواب های معادله دست یافت .با بازگشت به فضای سه بعدی درستی جواب های بدست آمده می تواند مورد ارزیابی قرار گیرد. در اینجا قصد داریم معادله شرودینگر را برای یک پتانسیل مناسب که بتواند توصیف کننده حالتهای مزونی $b\bar{b}$ و $c\bar{c}$ باشد، با استفاده از تکنیک های اشاره شده در بالاحل نماییم. انرزی حا لت های پیوندی مورد نظر در عمل می تواند طیف جرمی مربوط را بدهد. مطابقت مقادیرعددی بدست آمده با داده های آزمایشگاهی موجود می تواند تاییدی بر مناسب بودن پتانسیل مورد استفاده و روش محاسباتی بکار رفته باشد. در ادامه خواهیم دید چگونه تغییر در تکنینک ریاضی بکار رفته و استفاده از تبدیل ملین می تواند در نتایج بدست آمده برای طیف جرمی مزونی تاثیر بگذارد. نتایج می تواند با اصلاح پتانسیل بکار رفته نیز تغییر کند که به آن نیز خواهیم پرداخت.

واژه های کلیدی: *معادله شرودینگر در فضای N بعدی، تبدیل لاپلاس، تبدیل ملین، طیف جرمی مزونی*

The solution of Schrodinger equation in N dimensional space, using the Laplace and Mellin transformations at different potentials

Divsar, Mohsen; Mirjalili, Abolfazl

Department of Physics, Yazd University, Safaeiyeh, yazd

Abstract

By employing Laplace transformation on Schrodinger equation in N dimensional space, we see some singular points. Considering the behavior of equation around these points we could obtain the Eigen values of equation. Turning to usual 3-dimensional space the correctness of solutions can be evaluated. Here we intend to solve the Schrodinger equation, using the referred technique, for a specified potential which is describing the meson states of $b\bar{b}$ and $c\bar{c}$. The concerned binding energy can give us practically their mass spectrum. The compatible of the obtained numerical values with the experimental data, is confirming the adequate of used potential and also utilized computational method. In continuation we see that using differnt technique and employing the Mellin transformation the mass spectrum of mesons would be changed. The results can be changed using different potential which we also deal with it.

***Keywords**: Schrodinger equation in N dimensional space, Laplace transformation, Mellin transformation, Mass spectrum of meson.*

PACS No. 13

مقدمه

از آنجائیکه بررسی معادله شرودینگر در ابعاد بالا توانائی ریاضی بیشتری را فراهم خواهد کرد که به تحلیل مسئله مورد نظر بصورت دقیقتر و کاملتری پرداخته شود و از طرفی قادر باشیم به رهیافت شبه نسبیتی از این معادله دست یابیم[1] و همچنین تاثیر ابعاد بالا در صورت وجود را بر طیف جرمی سیستم مقید ذرات بدست آوریم، بررسی این معادله در ابعاد بالا مورد توجه بوده است. برای دست یابی به معادله شرودینگر در فضای N بعدی ابتدا لازم است عملگر لاپلاسی را در این فضا بدست آوریم. در این صورت قادر خواهیم بود به معادله شعاعی شرودینگر در این فضا برسیم. رفتار مجانبی جواب این معادله در فواصل دور به جوابی منجر خواهد شد که برای حل کامل معادله شعاعی مورد استفاده قرار خواهد گرفت. در این میان ضروری است به معادله ویژه مقداری

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

برای بخش زاویه ایی تابع موج در فضای N بعدی نیز توجه شود. در این مرحله با اعمال تبدیل لاپلاس بر روی معادله شعاعی شرودینگر و اعمال شرطی که جواب محدودی برای تابع موج در مبداء را بدهد، جواب عمومی معادله بدست خواهد آمد. بررسی رفتار این جواب در نقاط تکینه، منتهی به ویژه مقادیر انرژی معادله خواهد شد. با انتخاب یک پتانسیلی که علاوه بر رفتار کولمبی بتواند ویژگی محبوسیت کوارکی را شامل باشد، ویژه مقادیر بدست آمده از حل معادله شرودینگر در حضور پتانسیل مورد نظر می تواند بیانگر طیف جرمی مزون های $b\bar{b}$ و $c\bar{c}$ باشد. در ادامه با تغییر در تکنیک محاسباتی و استفاده از تبدیل ملین بجای تبدیل لاپلاس و همچنین اصلاح پتانسیل بکار رفته، تغییر در نتایج بدست آمده را بررسی خواهیم کرد.

تبدیل لاپلاس وحل معادله شرودینگر در فضای N بعدی

در اینجا ابتدا مروری بر حل معادله شرودینگر با استفاده از تبدیل لاپلاس خواهیم داشت. سابقه این کار به چندین سال پیش بر می گردد که بموازات روش هایی نظیر "روش حل سری" ، "روش حل تبدیل فوریه"، روش تکرار مجانبی" و چندین روش دیگر برای حل معادله شرودینگر تحت اثر پتانسیل هایی نظیر پتانسیل کولمبی، پتانسیل نوسانگر هماهنگ، پتانسیل نمایی و غیره، این روش نیز مورد استفاده قرار می گرفت .

پتانسیل مورد استفاده بصورت

$$V(r)=ar^2+br-\frac{c}{r}\ ,\ a>0 \quad (1)$$

می باشد که بعنوان پتانسیل غیرهماهنگ (an-harmonic) شناخته می شود. این پتانسیل برای توصیف اندرکنش بین کوارک و انتی کوارک بکار می رود که در واقع شامل پتانسیل کرنل (Cornel) بهمراه پتانسیل هماهنگ می باشد.

اکنون معادله شرودینگر در فضای N بعدی را در نظر می گیریم که بصورت زیر خواهد بود [2]:

$$[\nabla^2{}_N+2\mu(E-V(r))]\Psi_{nLM}(r,\Omega_N)=0$$

در اینجا Ω_N شامل متغیر های زاویه ایی $\theta_1,\theta_2,\theta_3,\dots,\theta_{n-2},\varphi$ می باشد و عملگر لاپلاسی در فضای **N بعدی بصورت زیر است** [2]:

$$\nabla^2{}_N=\frac{1}{r^{N-1}}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^{N-1}\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{\Lambda^2{}_{N-1}}{r^2}$$

در این رابطه $\Lambda^2{}_{N-1}$ مربع عملگر اندازه حرکت ابر زاویه ایی (hyper angular) می باشد و از رابطه ویژه مقداری زیر پیروی می کند:

$$\Lambda^2_{N-1}y_L^m(\Omega_N)=L(L+N-2)y_L^m(\Omega_N)$$

در اینصورت برای بخش شعاعی معادله شرودینگر داریم:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\frac{N-1}{r}\frac{d}{dr}-\frac{L(L+N-2)}{r^2}+2\mu(E-V(r))\right]R_{nL}(r)=0$$

دیده می شود که در حد $r\to\infty$ معادله شعاعی بالا دارای جوابی بصورت $R(r)\propto e^{-\alpha r^2}$ می باشد. حل کلی که در مبدا محدود باشد بصورت مقابل است: $R(r)=r^k e^{-\alpha r^2}f(r)\ ,k>0$

با جانشینی این عبارت در معادله شغاعی شرودینگر خواهیم داشت [2]:

$$rf''(r)+\left(\eta_{KN}-4\alpha r^2\right)f'(r)+\left[\frac{Q(K,L,N)}{r}-2\mu br^2+2\mu c+r\epsilon_{KN}\right]f(r)=0 \quad (2)$$

اکنون با بکار بردن تبدیل لاپلاس بصورت [3]

$$\phi(s)=\mathcal{L}\{f(t)\}=\int_0^\infty e^{-st}f(t)dt.$$

به رابطه زیر خواهیم رسید:

$$(s+\beta)\frac{d^2\phi(s)}{ds^2}+\left(\frac{1}{4\alpha}s^2+\lambda\right)\frac{d\phi(s)}{ds}+\left(\gamma s-\frac{\mu c}{2\alpha}\right)\phi(s)=0 \quad (3)$$

ضرایب موجود در این رابطه می توانند بر حسب ضرایب موجود در رابطه (2) نوشته شوند. در اینجا تابع $\phi(s)$ بصورت زیر است:

$$\phi(s)=\frac{C_{n\ell N}}{(s+\beta)^{n+1}},n=0,1,2,3,\dots \quad (4)$$

که در $s=-\beta$ دارای تکینگی است. با جانشیتی این فرم از تابع $\phi(s)$ در معادله (3) به روابط زیر خواهیم رسید[3]

$$\gamma=\frac{n+1}{4\alpha},\ \gamma\beta=\frac{\mu c}{2\alpha},\ (n+1)(n+2)-(n+1)\lambda-\frac{\mu c}{2\alpha}\beta=0.$$

آخرین رابطه در بالا با توجه به اینکه λ می تواند بر حسب ویژه مقدار انرژی E_{nlN} نوشته شود منتهی به رابطه زیر برای تراز های انرژی خواهد شد:

$$E_{nLN}=\sqrt{\frac{a}{2\mu}}(2n+2L+N)-\frac{b^2}{4a}$$

با جانشینی مقادیر عددی پارامترهای a و b و رفتن به فضای سه بعدی (N=3)، انرژی حالت پایه (n=0, L=0) و انرژی سایر حالت های برانگیخته سیستم مزونی بدست می آید. بدین ترتیب قادر خواهیم بود به

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

طیف جرمی مزونها ی مورد نظر که نوع آنها از طریق پارامتر جرمی μ تعیین می شود، دست یابیم.

اکنون که با روش تبدیل لاپلاس برای حل معادله شرودینگر در فضای N بعدی آشنا شدیم در بخش بعدی محاسبات مبتی بر تبدیل ملین برای حل این معادله را ارائه خواهیم نمود.

تبدیل ملین برای حل معادله شرودینگر در فضای N بعدی

چنانچه از تبدیل ملین که بصورت زیر تعریف می شود[4]

$$M\{f(t)\}=\int_0^\infty t^s f(t)\,dt=\phi(e^{-s}) \quad (5)$$

استفاده کنیم، شکل تبدیل یافته معادله (2) بصورت زیر خواهد شد

$$(-2\mu b-4\alpha e^{-s})\phi''(e^{-s})$$
$$+(-\varepsilon_{LN}+e^{-2s}-2\alpha e^{-s})\phi'(e^{-s})$$
$$+\left(2\mu c+\eta_{LN}e^{-s}-2e^{-2s}+4\alpha e^{-s}\right)\phi(e^{-s})=0 \quad (6)$$

در این معادله $\phi(e^{-s})$ همان تابع لاپلاس می باشد چرا که مطابق رابطه ایی که برای تبدیل ملین در (5) داریم تبدیل ملین و تبدیل لاپلاس از یک تابع با یکدیگر مرتبط می باشند. در واقع برای رسیدن به رابطه (6) از روابط زیر بهره جستیم [4]

$$M\{f^{(n)}(t)\}=e^{-sn}M\{f(t)\}-\sum_{k=0}^{n-1}e^{-s(n-1-k)}f_{(0)}^{(k)}$$
$$M\{t^n f(t)\}=(-1)^n\phi^{(n)}(e^{-s}) \quad (7)$$

همانند آنچه برای تبدیل لاپلاس داشتیم رابطه زیر را برای $\phi(e^{-s})$ بکار می بریم.

$$\phi\left(e^{-s}\right)=\frac{c_{nLN}}{\left(e^{-s}+\beta\right)^{n+1}} \quad (8)$$

با جابگذاری رابطه بالا در معادله (6) و مرتب نمودن آن بر حسب توان های مختلف از e^{-s} نتایج زیر حاصل می شود:

$$\begin{cases}1:\ (n+1)(n+2)-(n+1)\lambda-\dfrac{\mu c}{2\alpha}\beta=0\\ 2:\ \gamma\beta=\dfrac{\mu c}{2\alpha}-2(n+1)\\ 3:\ \gamma=-\dfrac{(n+1)}{4\alpha}\end{cases}$$

با حل همزمان این روابط و اینکه پارامتر β می تواند بر حسب λ و نهایتا تراز انرژی نوشته شود، نتیجه زیر برای ترازهای انرژی حاصل خواهد شد:

$$E_{nLN}=\sqrt{\frac{a}{2\mu}}\left[2n+2L+N+4\right]-\frac{b^2}{4a}-2b$$

در اینجا نیز با انتخاب N=3 و بکار گیری مناسب اعداد کوانتمی n و L می توانیم به طیف انرژی سیستم مزونی مورد نظر در فضای سه یعدی که از حل معادله شرودینگر و یا استفاده از تبدیل ملین صورت گرفته است، دست یابیم.

پتانسیل ناهماهنگ اصلاح شده : تبدیل لاپلاس و ملین

اکنون پتانسیل اصلاح شده $V(r)=ar^2+br-\frac{c}{r}-\frac{d}{r^2}$ را در نظر می گیریم و به حل معادله شرودینگر در فضای N بعدی تخت این پتانسیل با استفاده از تبدیل لاپلاس و سپس تبدیل ملین می پردازیم.

الف) پتانسیل اصلاح شده و تبدیل لاپلاس

همانند قبل با فرض اینکه بخش شعاعی تابع موج را بصورت زیر داشته باشیم

$$R_{nL}(r)=r^k e^{-\alpha r^2}f(r)\ ,\qquad k>0$$

از بخش شعاعی معادله شرودینگر به معادله دیفرانسیل زیر می رسیم[5]:

$$rf''(r)+\left(\eta_{LN}-4\alpha r^2\right)f'(r)$$
$$+\left(2\mu c-2\mu b r^2+\frac{2\mu d}{r}+r\varepsilon_{kN}\right)f(r)=0 \quad (9)$$

پس از اعمال تبدیل لاپلاس معادله زیر را خواهیم داشت:

$$\left[2\mu b+4\alpha s\right]\phi'''(s)+\left[\varepsilon_{LN}+8\alpha+4\alpha+s^2\right]\phi''(s)$$
$$+\left[-2\mu c-\eta_{LN}s+4s\right]\phi'(s)+\left[-\eta_{LN}+2\mu d+2\right]\phi(s)=0$$

همانند قبل باجانشینی $\phi(s)=\frac{C_{n\ell N}}{(s+\beta)^{n+1}},n=0,1,2,3,\ldots$

در رابطه بالا و جداسازی توان های مختلف از متغیر s **و پس از انجام محاسبات لازم به رابطه زیر برای ویژه مقادیر انرژی تحت پتانسیل اصلاح شده می رسیم:**

$$E=\sqrt{\frac{a}{2\mu}}\left(2n+2L+N\right)-\frac{b^2}{4a}$$

ب) پتانسیل اصلاح شده و تبدیل ملین

با بکار گیری تبدیل ملین که توسط رابطه (5) تعریف شده است و استفاده از روابط (7) که از این تبدیل ناشی می شود ، به معادله دیفرانسیل زیر برای تابع $f(r)$ که مربوط به بخش شعاعی تابع موج می باشد، خواهیم رسید:

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$$\left(2\mu b+4\alpha e^{-s}\right)\phi'''\left(e^{-s}\right)+\left(e^{-2s}-12\alpha e^{-s}+\varepsilon_{LN}\right)\phi''\left(e^{-s}\right)$$
$$+\left(-4e^{-2s}-\eta_{LN}e^{-s}+12\alpha e^{-s}+2\mu c\right)\phi'\left(e^{-s}\right)$$
$$+\left(4e^{-2s}-4\alpha e^{-s}-\eta_{LN}e^{-s}+2\mu d\right)\phi\left(e^{-s}\right)=0 \quad (9)$$

اکنون با جانسیتی رابطه (8) برای $\phi(\mathrm{e}^{-s})$ و جداسازی توان های مختلف از متغیر e^{-s} به رابطه زیر برای تراز های انرژی در فضای N بعدی تحت تاثیر پتانسیل اصلاح شده می رسیم:

$$E=\sqrt{\frac{a}{2\mu}}\left(2n+6+N+2L\right)-\frac{b^2}{4a}$$

با جانشینی N=3 ترازهای انرژی در فضای سه بعدی به ازاء اعداد کوانتمی n و L قابل حصول است.

نتیجه گیری

در این مقاله حل معادله شرودینگر در فضای N بعدی را بررسی نمودیم. پتانسیل بکاررفته از نوع ناهماهنگ می باشد که برای توصیف اندرکنش کوارک-آنتی کوارک مناسب می باشد.. تکنیک بکار رفته برای حل معادله استفاده از تبدیل لاپلاس هست که این امکان را می دهد تا با توجه به رفتار تکنیکی که تابع موج در فضای لاپلاس دارد، بتوانیم ویژه مقادیر انرژی را بدست آوریم. نتایج عددی بدست آمده در جدول زیر آمده است. در محاسبه مربوطه، برای مقادیر عددی پارامترهایی که در پتانسیل ناهماهنگ وجود دارد از مرجع [6] استفاده نمودیم.

در ادامه کار به حل معادله شرودینگر در فضای N بعدی منتهی با استفاده از تبدیل ملین پرداختیم. برای این منظور از رابطه ای که بین این دو تبدیل وجود دارد استفاده نمودیم. با توجه به اینکه در این حالت متعیری که برای تابع موج بکار می رفت با یک تابع نمایی جانشین می شود و از آنجائیکه رفتار تکنیکی از تابع موج نسبت به یک متغیر بصورت رفتار تکنیکی تابع موج نسبت به یک تابع نمایی از آن متغیر ظاهر خواهد شد انتظار می رود نتایجی که از بررسی تکنیکی تابع موج برای ترازهای انرژی با استفاده از تبدیل ملین بدست می آوریم در مقابسه با نتایج تجربی، بهبود بیشتری را نشان دهد.

در ادامه و بمنظور اینکه رفتار محبوسیت کوارکی در فواصل دور و از آنطرف رفتار آزادی مجانبی کوارک در فواصل نزدیک بیشتر مشخص شود و نقش پتانسیل مقیدی نظیر پتانسی کولمبی که آزادی مجانبی کوارک ها را مختل می کند بیشتر نمایان گردد پتاسیل غیرهماهنگ را اصلاح نموده و جمله ایی که متناسب با عکس مربع فاصله باشد را به آن اضافه نمودیم. همانند قبل به حل معادله شرودینکر در فضای N بعدی و با استفاده از تبدیل های لاپلاس و ملین پرداختیم. از آنجائیکه جمله اضافه شده نقش پتاسیل کولمبی را در مقایسه با رفتار آزادی مجانبی که برای کوارک ها در فواصل کوتاه داریم، افزایش خواهد داد، انتظار می رود نتایج عددی مربوط به ترازهای انرژی تحت تاثیر پتانسیل اصلاح شده در مقایسه با قبل از مقادیر تجربی فاصله بگیرد. هرجند انتظار داریم بازهم روش تبدیل ملین بر روش تبدیل لاپلاس مزیت داشته باشد نتایج عددی گزارش شده در جدول زیر که مبتنی بر رابطه $M=2m+E$ می باشد، تاییدی است بر مطلبی که در بالا آمده است.. در این رابطه m جرم هریک از کوارک های b ویا c می باشد و E معرف ترازهای انرژی است که در قبل محاسبه شده اند.

تحلیل نتایج بالا این پیشنهاد را ایجاد می کند که جمله اصلاح شده در پتانسیل ناهماهنگ را بصورت یک جمله مربعی از فاصله.و نه بصورت جمله معکوس مربع از فاصله بگیریم . چنانچه اطلاعات لازم از تابع موج سیستم مزونی که نوعی اتم کوارکی هست هم را داشته باشیم می توانیم به محاسبه شعاع میانگین اتم کوارکی بپردازیم . این موضوعات می توانند بعنوان کارهای پژوهشی جدید در آینده دنبال شود..

مقدار آزمایشگاهی	پتانسیل غیر هماهنگ جدید،ملین	پتانسیل غیر هماهنگ جدید،لاپلاس	پتانسیل غیر هماهنگ، تبدیل ملین	پتانسیل غیر هماهنگ، تبدیل لاپلاس	اتم چارمونیم، n=1، L=0
3.07 GeV/c^2	3.94 GeV/c^2	3.20 GeV/c^2	3.18 GeV/c^2	3.20 GeV/c^2	
10.56 GeV/c^2	11.2 GeV/c^2	9.91 GeV/c^2	10.53 GeV/c^2	9.91 GeV/c^2	اتم باتونیم، n=1، L=0

جدول ۱: طیف جرمی اتم های چارمونیم و باتونیم در حالت پایه تحت تاثیر پتانسیل های غیر هماهنگ.

مرجع‌ها

[۱] R.Carles, E.Moulay; "Higher order Schrodinger equation'', J.Phys.A: Maths and Theor 46 (2012) 35.
[۲] S. H. Dong; " *Wave Equations in Higher Dimensions*'', Springer, New York, 2011.
[۳] T.Das; "Treatment of N-dimensional Schrödinger equation for anharmonic potential via Laplace transform'', Electron.J.Theor.Phys. 35 (2016) 207.
[٤] M. R. Spiegel, " Schaum's Outline of Theory and Problems of Laplace Transforms'', Schaum Publishing, 1965.
[٥] R. Kumar and F. Chand, "Series solutions to the N-dimensional radial Schrödinger equation for the quark–antiquark interaction potential'' Phys.Scr., 85 (2012), 055008.
[٦] R.Kumar, D.Kumar and F.Chand, Proceedings of the DAE Symp.on Nucl.Phys 57 (2012) 664.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تحول میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی باریکه لیزر پرتوان در پلاسما کرونای تبخیر شده از یک هدف جامد در اثر نیروی اثرگذار

علیلو ، سیما[1] ؛ شاه‌رسائی، لعیا[2] ؛سبحانیان ، صمد[3]

[1،3،2]دانشکده فیزیک دانشگاه تبریز ،تبریز

چکیده

دراین مقاله، تحولات میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی هنگام ورود لیزر پرتوان به داخل پلاسمای ناهمگن با چگالی خطی متغیر با فضا بررسی شده‌است. نتایج حاکی از آن است که برخلاف خلا که میدان‌هاالکتریکی و مغناطیسی اختلاف فاز صفر درجه را دارند اما در داخل پلاسما اختلاف فاز متغیر با فضا می‌باشد. با افزایش چگالی الکترون‌های پلاسما نیروی اثرگذار حاصل ازگرادیان مربع میدان الکتریکی لیزر پرتوان، باعث تبخیر کرونای پلاسما از یک هدف جامد به سمت خلا می‌شود و واکنش فشرده سازی اتفاق می‌افتد.

واژه های کلیدی: *میدان الکتریکی، میدان مغناطیسی،نیروی اثرگذار، کرونای پلاسما، تبخیر.*

Evolution of electric and magnetic fields of high-power laser beams in a plasma corona produced by ablation of a solid target via ponderomotive force

Alilou, Sima[1]; Shahrassai, Laya[2] ; Sobhanian, Samad[3]

[1,2,3] Department of Physics, University of Tabriz, Tabriz.

Abstract

In this article, the evolution of electric and magnetic fields of a high-power laser incident to inhomogeneous plasma with linearly variable density is investigated. The results indicate that, unlike the vacuum case, where the electric and magnetic fields have a phase difference of 0 degrees, inside the plasma, the phase difference is variable with space. The negative gradient of the square of the electric field are produces the nonlinear forces which drive the plasma corona towards the vacuum (ablation) and give a compression reaction to the plasma interior.

***Keywords**: Electric Field, Magnetic Field, Ponderomotive Force, Ablation*

PACS No. *30, 42, 50, 70*

مقدمه

در طول چند دهه گذشته، ما شاهد تولید میدان های مغناطیسی در زمینه های مختلف فیزیک از جمله محیط های کیهانی، بقایای ابرنواخترها، انفجارهای پرتو گاما و پلاسمای تولید شده با لیزر و غیره بوده ایم[1]. در سیستم های با مقیاس های مختلف پلاسما با میدان‌های مغناطیسی مواجه می‌شویم. در مطالعات تئوری و تجربی، منشأ میدان‌های مغناطیسی در کیهان و برهمکنش‌های لیزر پلاسما مورد توجه فوق‌العاده‌ای قرار گرفته-است.برای استخراج میدان مغناطیسی در هر حالت باید به معادلات

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مگنتوهیدرودینامیک، قانون اهم تعمیم یافته، اثر فارادی و ... متوسل شویم[2].

برهمکنش لیزرها با شدت بالا با پلاسما، برای شتاب‌دهی الکترون‌ها توسط لیزر، یا در لیزرهای الکترون آزاد و انرژی همجوشی، تبخیر لیزری مواد در تکنولوژی و غیره منجر به کشف همزمان اجزای طولی پرتوهای لیزر در خلاء شد. نیروهای الکترودینامیکی که روی پلاسما یا بارهای الکتریکی آزاد اثر می کنند، اساساً متفاوت از نیروی کولنی هستند. این نیروها غیرخطی هستند و در یک مفهوم کلی نیروهای غیرخطی نامیده می شوند[3].

مطالعات تئوری و تجربی نیروی غیرخطی (نیروی اثرگذار[1] که توسط کلوین کشف شد) اساس جدیدی برای تکمیل مگنتوهیدرودینامیک شد. نیروی اثرگذار اساساً با ترکیب نیروهای ماکروسکوپی مکانیکی و کمیات مرتبه دوم میدان های الکتریکی و مغناطیسی غیرخطی است. این نیرو زمانی ایجاد می شود که یک میدان الکتریکی نوسانی غیر یکنواخت در یک دی الکتریک وجود داشته باشد، و می تواند به عنوان یک اثر مقیاس زمانی آهسته، یا اثر متوسط، به دلیل عدم یکنواختی نوسانات فرکانس بالا میدان الکتریکی دیده شود.

وقتی لیزر پرتوان(غالبا لیزرهای فمتوثانیه) بر روی سطح یک جامد فرود می‌آید،اتم‌های سطح جامد را یونیزه کرده و برای ماده مورد نظر یک گذار از حالت جامد به حالت بخار اتفاق افتاده و یک نوع پلاسما در سطح آن تشکیل می‌شود که کرونا گویند[4].

تکانه پلاسمای تبخیرشده ۲در کرونا به طور خودکار منجر به پس زدن پلاسما به سمت خلا می شود و واکنش این پلاسمای گرم شده چگالی هدف جامد را تا چهار برابر یا بیشتر افزایش داده و آن را فشرده می‌سازد[5].ازاین فرآیند تبخیر سطح و فشرده‌سازی پلاسما برای تحقق آزمایش‌های گداخت هسته‌ای با محصور سازی لیزر استفاده می‌گردد. در واقع فرآیند تبخیر کرونای پلاسما از یک هدف جامد توسط نیروی اثرگذار اتفاق می‌افتد[6].

در کار پژوهشی حاضر ابتدا اختلاف فاز میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی در خلا و پلاسما با نمایه چگالی خاص محاسبه شده و سپس نیروی اثرگذارکه باعث ایجاد کرونای پلاسما تبخیر شده از یک هدف جامد توسط باریکه لیزر پرتوان می‌شود بررسی خواهدشد.

محاسبات

برخی از خواص امواج الکترومغناطیسی در پلاسماهای با ضریب شکست فضایی متغیر (پلاسمای ناهمگن) در این بخش مورد بحث قرار خواهند گرفت.

معادله موج دامنه میدان الکتریکی لیزر E_r، متغیر با مکان به صورت زیر نمایش داده می‌شود[7]:

$$\nabla^2 E_r + \frac{\omega^2}{c^2} n^2 E_r = 0 \qquad (1)$$

که در این معادله n ضریب شکست،c سرعت نور و □ فرکانس لیزر فرودی است. از تغییرات زمانی صرف نظر می‌شود. برای حالت بدون برخورد با ضریب شکست واقعی، ساده سازی حالت یک بعدی منجر به یک معادله دیفرانسیل می شود:

(2)

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} E_r + \frac{\omega^2}{c^2} n^2 E_r = 0$$

با فرض نمایه چگالی بصورت $n_e = n_0(1 - \frac{x}{L})$ ، و با استفاده از تعریف ثابت دی‌الکتریک در پلاسما به صورت[8]:

(3)

$$\varepsilon = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$$

ضریب شکست بصورت زیر یافت می‌شود[8].

$$n^2 = \varepsilon = \frac{x}{L}$$

که L طول پلاسما است. با جایگذاری ضریب شکست در معادله موج و حل آن به روش WKB که در شرایط خاصی برای توصیف حالت کلی یک وابستگی فضایی ضریب شکست استفاده می‌شود، جوابی بصورت زیر خواهیم داشت[9]:

[1] Ponderomotive Force
[2] Ablation

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

(4)

$$E_r = E_0 Ai\left[-\frac{x\omega^2}{c^2 L\left(-\frac{\omega^2}{c^2 L}\right)^{2/3}}\right]$$

که در آن Ai نمایشگر تابع ایری [3] است. با استفاده از معادله القای فارادی و جایگذاری میدان الکتریکی می‌توان میدان مغناطیسی B_r حاصل برای لیزر را نیز محاسبه کرد[10]:

(5)

$$B_r = -\frac{ic}{\omega}\frac{\partial}{\partial x}E_r$$

$$B_r = \frac{ic}{\omega}\left(\frac{\omega^2}{c^2 L}\right)^{1/3}\frac{d\left(Ai\left[-x\left(\frac{\omega^2}{c^2 L}\right)^{1/3}\right]_r\right)}{dx}$$

با استفاده ازمعادلات هیدرودینامیک و الکترودینامیک و میدان های E و B امواج الکترومغناطیسی نیروهای غیرخطی نیروی اثرگذار محاسبه می‌شود[11].

(6)

$$F_p = \frac{\left(1-n^2\right)}{16\pi}\nabla E^2$$

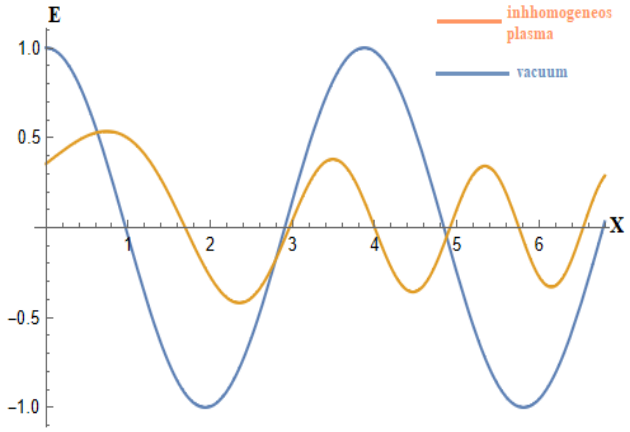
با جایگذاری ضریب شکست و گرادیان مربع میدان الکتریکی نیروی اثرگذار را می‌توان به شکل زیر پیدا کرد:

(7)

$$F_p = \frac{\left(1-\left(\frac{x}{L}\right)^2\right)}{16\pi}\left(-2\left(\frac{\omega^2}{c^2 L}\right)^{1/3} Ai\left[-x\left(\frac{\omega^2}{c^2 L}\right)^{1/3}\right]\frac{dAi\left[-x\left(\frac{\omega^2}{c^2 L}\right)^{1/3}\right]}{dx}\right)$$

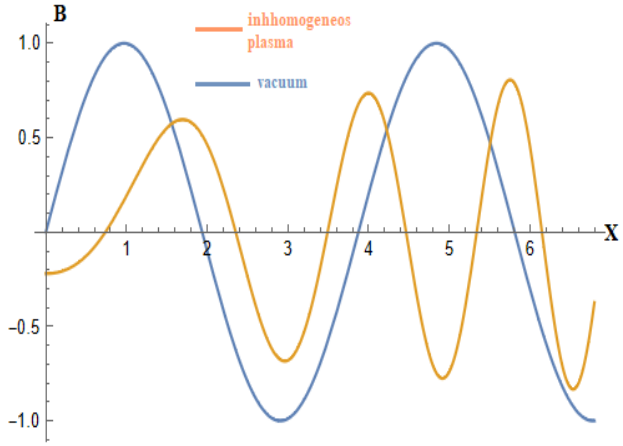
نتایج

در شکل 1، با ترسیم میدان الکتریکی در خلا و پلاسمای ناهمگن با چگالی خطی متغیر با فضا مشاهده می‌شود که دامنه میدان الکتریکی نسبت به خلا کاهش می‌یابد و در مسیر محور Xها میرا می‌شود.



شکل 1: میدان الکتریکی در خلا و پلاسمای ناهمگن با چگالی متغیر خطی.

در شکل 2، میدان مغناطیسی حاصل از معادله (5) و میدان مغناطیسی خلا را ترسیم نموده‌ایم. نتایج حاکی از آن است که دامنه میدان مغناطیسی نیز نسبت به خلا در داخل پلاسما کاهش می‌یابد ولی رفتاری رو به رشد دارد.

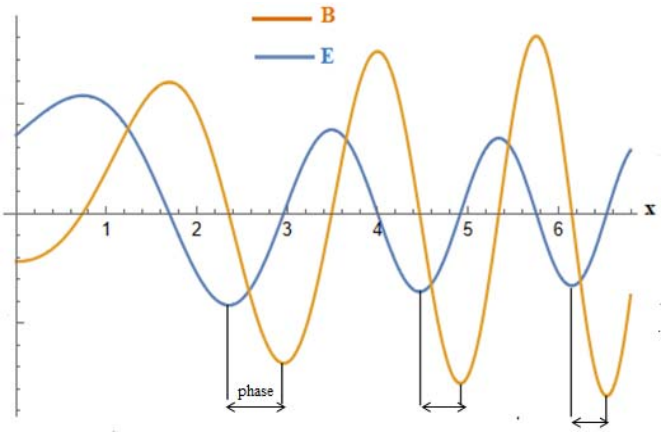


شکل 2: میدان مغناطیسی در خلا و پلاسما ناهمگن با چگالی متغیر خطی.

در شکل 3، میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی در پلاسمای ناهمگن با چگالی خطی متغیر با فضا رسم شده‌است. مشاهده می‌شود که اختلاف فازی بین میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی هنگام ورود لیزر پرتوان به داخل پلاسمای ناهمگن، به‌وجود می‌آید که با افزایش x،اختلاف فاز کاهش می‌یابد در صورتی که اختلاف فاز میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی در خلا صفر درجه می‌باشد.

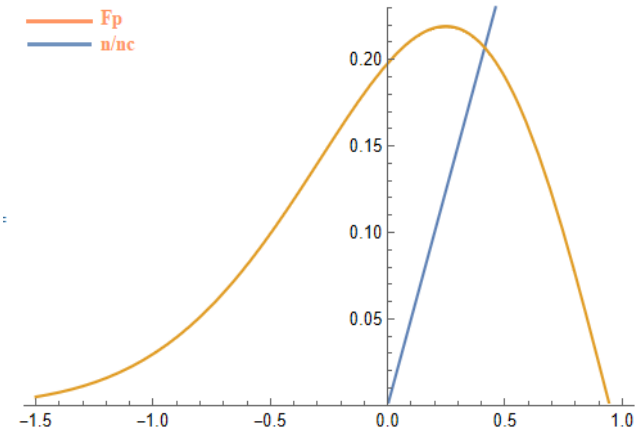
[3] Airy Function

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل3: تحول میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی باریکه لیزر پرتوان در پلاسما ناهمگن

در شکل 4،نیروی اثرگذار وچگالی الکترون پلاسما که برحسب x رسم شده‌است. علیرغم تمام پیچیدگی های نظریه هیدرودینامیکی، درک نتیجه نسبتاً آسان است. اگر لیزر در یکبعد به داخل پلاسما با چگالی الکترونی به طور خطی در حال افزایش است، متوسط مربع میدان الکتریکی لیزری که از خلاء می‌آید به دلیل کاهش ضریب شکست از مقدار مربوط به خلاء کوچک‌تر است. نیروهای غیرخطی کرونای پلاسما را به سمت خلاء هدایت می کنند (تبخیر) و واکنش فشرده سازی در داخل پلاسما اتفاق می‌افتد.



شکل4: نیروی اثرگذار و چگالی الکترون پلاسما.

نتیجه گیری

در برهمکنش لیزر- پلاسما نیروهای الکترودینامیکی مورد توجه است که نیروهای غیرخطی نامیده می شوند.با بررسی تحولات میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی، دامنه میدان الکتریکی در هنگام نفوذ لیزر به داخل پلاسما با افزایش ضریب شکست میرا می‌شود و دامنه میدان مغناطیسی رشد می‌کند. هنگامی که لیزر به سطح جامدبرخورد می‌کند، درسطح آن کرونای پلاسما تشکیل می‌شود. نیروی غیر خطی اثرگذار برای یک پلاسمای بدون برخورد وناهمگن محاسبه و ترسیم شد.مشاهده شد که تبخیر کرونای پلاسما از یک هدف جامد توسط لیزر پرتوان در جهت مخالف لیزر تابشی گسترش می‌یابد.

مرجع‌ها

[1] Park, H. S., Huntington, C. M., Fiuza, F., Drake, R. P., Froula, D. H., Gregori, G., ... & Zylstra, A. B. (2015). Collisionless shock experiments with lasers and observation of Weibel instabilities. *Physics of Plasmas*, **22**(5), 056311.
[2] Knoepfel, H. E. (2008). *Magnetic fields: a comprehensive theoretical treatise for practical use*. John Wiley & Sons.
[3] Brodin, G., Misra, A. P., & Marklund, M. (2010). Spin contribution to the ponderomotive force in a plasma. *Physical review letters*, **105**(10), 105004.
[4] Allmen, M. V., & Blatter, A. (2013). *Laser-beam interactions with materials: physical principles and applications* (Vol. 2). Springer Science & Business Media.
[5] Borghesi, M., Fuchs, J., Bulanov, S. V., Mackinnon, A. J., Patel, P. K., & Roth, M. (2006). Fast ion generation by high-intensity laser irradiation of solid targets and applications. Fusion science and technology, **49**(3), 412-439.
[6] Limpoukh, Ĭ., & Rozanov, V. B. (1984). Transverse structures (filaments, spicules, jets) in a laser plasma. Soviet Journal of Quantum Electronics, **14**(7), 955.
[7] Kumar, D., Singh, J., & Baleanu, D. (2017). A new analysis for fractional model of regularized long□wave equation arising in ion acoustic plasma waves. Mathematical Methods in the Applied Sciences, **40**(15), 5642-5653.
[8] Eliezer, S., & Mima, K. (Eds.). (2008). *Applications of laser-plasma interactions*. CRC press.
[9] Polynkin, P., Kolesik, M., Moloney, J. V., Siviloglou, G. A., & Christodoulides, D. N. (2009). Curved plasma channel generation using ultraintense Airy beams. Science, **324**(5924), 229-232.
[10] Van der Ziel, J. P., Pershan, P. S., & Malmstrom, L. D. (1965). Optically-induced magnetization resulting from the inverse Faraday effect. Physical review letters, **15**(5), 190.
[11] Hora, H. (1981). *Physics of laser driven plasmas*.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی تحلیلی رفتار امواج آکوستیکی در یک پلاسمای کوانتومی از نقطه نظر انرژی

اسلمی[1]، بهاره، بهجت[1]، عباس، شاه منصوری[2]، مهران، و توسلی[1]، محمد کاظم
[1]گروه اپتیک و لیزر، دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد
[2]گروه پلاسما دانشکده فیزیک، دانشگاه اراک

چکیده

در پژوهش حاضر به بررسی ویژگی‌های امواج آکوستیکی در پلاسما در حضور اثرات کوانتومی پرداخته می‌شود. بدین منظور، مجموعه‌ای از معادلات پیوستگی، معادلات حرکت و معادلات ماکسول به کار گرفته می‌شوند تا نوعی رابطهٔ انرژی و سرعت تعمیم یافته به دست آید. نتایج تحلیلی ما گویای اصلاح رابطهٔ انرژی و سرعت این امواج توسط تصحیحات کوانتومی است.

واژه های کلیدی: انتقال انرژی، امواج آکوستیکی، پتانسیل تبادلی، پلاسمای کوانتومی

Analytical study of the behavior of acoustic waves in a quantum plasma from the point of view of energy

[1]Aslami, B; [1]Behjat, A.; [2]Shahmansouri, M; [1]Tavassoly, M. K.

[1]Laser and Optics Physics, Department of Physics, Yazd University

[2]Plasma Physics, Department of Physics, Arak University

Abstract

In the present study, the properties of acoustic waves in plasma, in the presence of quantum effects, are investigated. For this purpose, the set of continuity equations, equations of motion and Maxwell equations are used to obtain a generalized relationship between energy and generalized velocity. Our analytical results show that the relationship between the energy and velocity of these waves is improved by quantum corrections.

Keywords: Acoustic waves, Exchange potential, Energy transport, Quantum plasmas

PACS No:50

مقدمه

پلاسماها اغلب به عنوان حالت چهارم ماده در کنار گازها، مایعات و جامدات توصیف می‌شوند. در واقع، پلاسما گازی شبه‌خنثی از ذرات باردار و خنثی است که رفتار جمعی از خود نشان می‌دهد. منظور از شبه‌خنثی بودن این است که حتی اگر ذرات تشکیل دهنده پلاسما از الکترون‌ها و یون‌های آزاد تشکیل شده باشند، چگالی بار کلی آن‌ها یکدیگر را در حالت تعادل، خنثی می‌کند. رفتار جمعی نیز به این معنی است که اختلالات موضعی در تعادل، می‌تواند تأثیر زیادی بر نقاط دورافتاده پلاسما داشته باشد [1]. یکی از مباحث مهم در پلاسما مطالعه امواج الکترومغناطیسی و الکترواستاتیکی است. به طور کلی نظریه انتشار موج، موضوع مهمی در فیزیک است. روش‌های زیادی وجود دارد که پلاسما می‌تواند

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

امواج را پشتیبانی کند که بستگی به نوع میدان الکتریکی و مغناطیسی دارد. بر همین اساس امواج در پلاسما به دو دسته امواج الکترومغناطیسی و امواج الکترواستاتیک تقسیم می‌شوند. امواج الکترومغناطیسی شامل دو نوع موج موازی و عمود بر میدان مغناطیسی است. امواج الکترواستاتیک شامل موج لانگمیوئر[1] و موج آکوستیک[2] است. امواج آکوستیک نوعی از نوسانات طولی یون‌ها و الکترون‌ها در پلاسما هستند که رفتار آن‌ها بیشتر شبیه حرکت امواج صوتی در یک گاز خنثی است [2]. پدیده انتقال انرژی توسط امواج یک مساله مهم و شناخته شده است. این مساله در فیزیک پلاسما نیز مورد توجه قرار گرفته است. بیش از یک دهه است که در نظر گرفتن جنبه‌های کوانتومی، برای اجزاء تشکیل دهنده پلاسما، پدیدار شدن ویژگی‌های جدیدی را برای برخی از محیط‌های پلاسمایی و ناپایداری‌های موجود در آن‌ها نمایان کرده است [3]. پلاسمای کوانتومی بر خلاف پلاسمای آزمایشگاهی و فضایی که از آمار ماکسول بولتزمن تبعیت می‌کنند، با آمار فرمی دیراک توصیف می‌شود.

در مرجع [4] انتشار انرژی الکرواستاتیکی توسط موج الکترواستاتیکی در یک پلاسمای کوانتومی همگن و نامحدود بررسی شده است و پاسخ تحلیلی برای چگالی انرژی و سرعت شارش انرژی بدست آمده است. همچنین، گروهی از محققین با احتساب آثار اسپینی، پدیده انتقال انرژی در پلاسمای کوانتومی را مورد بررسی قرار داده‌اند [5]. انتقال انرژی از طریق امواج آکوستیکی در پلاسمای کوانتومی نیز مبحثی مهم و کاربردی است. یکی از کاربردهای این موضوع، در ترابرد اطلاعات در قطعات الکترونیکی کوچک است. لذا در این مقاله ما با تمرکز بر این نوع امواج، به مطالعه انتقال انرژی از طریق آن‌ها در پلاسمای کوانتومی می‌پردازیم. در بخش اول فرضیات و محاسبات تحلیلی را انجام داده و در بخش دوم ملاحظات انرژی و در نهایت نتایج حاصل ارائه می‌شود.

1. فرضیات و محاسبات تحلیلی

ابتدا معادلات پیوستگی، معادلات حرکت و معادلات ماکسول را به به ترتیب به صورت روابط (1) تا (6)، در نظر می‌گیریم:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t}+\nabla.(v_e n_e)=0 \qquad (1)$$

$$\frac{\partial v_e}{\partial t}=-\frac{e}{m}E-\frac{1}{m_e n_e}\nabla P_F+\frac{\hbar^2}{2m_e^2}\nabla\left(\frac{\nabla^2\sqrt{n_e}}{\sqrt{n_e}}\right) \qquad (2)$$

$$\nabla\times E=-\frac{1}{c}\frac{\partial B}{\partial t} \qquad (3)$$

$$\nabla\times B=\frac{1}{c}\frac{\partial E}{\partial t}-\frac{4\pi e n_0}{c}v_e \qquad (4)$$

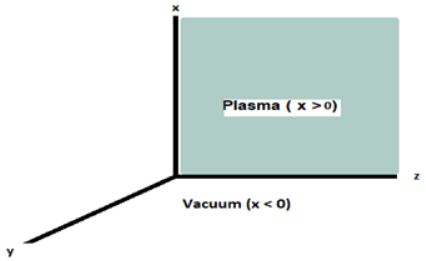
$$\nabla . B=0 \qquad (5)$$

$$\nabla . E=4\pi e(n_0-n_e) \qquad (6)$$

با خطی‌سازی رابطه (1) و (2) به ترتیب معادلات زیر حاصل می‌شود:

$$\frac{\partial n_1}{\partial t}+n_0\nabla.v_1=0 \qquad (7)$$

$$\frac{\partial v_1}{\partial t}=-\frac{e}{m}E-\frac{\alpha^2}{n_0}\nabla n_1+\frac{\beta^2}{2m_e^2}\nabla\left(\nabla^2 n_1\right) \qquad (8)$$



شکل 1: طرح شماتیک فصل مشترک پلاسما - خلاء. فصل مشترک پلاسما - خلاء در صفحه‌ی y-z واقع است.

از ترکیب معادلات (6) تا (8) و این فرض که همه کمیت‌های اختلالی به صورت $\psi(x)e^{ik_y y-i\omega t}$ تغییر کنند، می‌توان معادله زیر را برای چگالی الکترون اختلالی به دست آورد:

$$\frac{\partial^2 n_1}{\partial x^2}-\gamma_p^2 n_1=0 \qquad (9)$$

که در آن $\gamma_p=\sqrt{k_y^2+\frac{\omega_p^2-\omega^2}{v_F^2+\frac{\hbar^2 k_y^2}{4m^2}}}$ تعریف شده است.

حضور ثابت پلانک در این رابطه، کوانتومی بودن معادله را نشان می‌دهد. بطور مشابه پس از مقداری محاسبه، معادله موج برای میدان مغناطیسی به صورت رابطه زیر بدست خواهد آمد:

[1] Langmuir wave
[2] Acoustic wave

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$$\frac{\partial^2 B}{\partial x^2} - \alpha_p^2 B = 0 \qquad (10)$$

که در آن $\alpha_p = \sqrt{k_y^2 + \frac{\omega_p^2 + \omega^2}{c}}$ تعریف شده است.

پاسخ معادلات (۹) و (۱۰) به ترتیب با روابط زیر داده می‌شود:

$$n_1 = \begin{cases} 0 & ,x < 0 \\ Ae^{-\gamma_p x} & ,x > 0 \end{cases} \qquad (11)$$

$$B = \begin{cases} F_1 e^{\alpha_v x} & ,x < 0 \\ F_2 e^{\alpha_p x} & ,x > 0 \end{cases} \qquad (12)$$

که در آن $\alpha_v = \sqrt{k_y^2 - \omega^2/c^2}$ است و A ، F_1 و F_2 ثابت هستند. بنابراین، به کمک معادلات ماکسول می‌توان رابطه زیر را برای میدان الکتریکی بدست آورد:

$$E = \begin{cases} D_1 e^{\alpha_v x} & ,x < 0 \\ D_2 e^{-\alpha_p x} - 4\pi A\left[v_{Fe}^2 - \frac{\hbar^2\left(r_p^2 - k_y^2\right)}{4m^2}\right]\frac{e^{-\gamma_p x}}{\omega_p^2 - \omega^2} \times & \\ \left[-r_p \hat{x} + ik_y \hat{y}\right] & ,x > 0 \end{cases} \qquad (13)$$

که در آن D_1 و D_2 دو ثابت هستند.

با اعمال شرایط مرزی در فصل مشترک دو محیط (پلاسما و خلا) و با توجه به این نکته که سرعت در راستای x (v_x) در مرز صفر است، معادله پاشندگی امواج اکوستیک به صورت رابطه زیر بیان می‌شود:

$$\omega_p^2 k_y^2 = \gamma_p\left[\omega^2 \alpha_p - \left(\omega_p^2 - \omega^2\right)\alpha_v\right] \qquad (14)$$

این معادله بیانگر رابطه پاشندگی سامانه در پلاسمون - پلاریتون سطحی فشرده در فصل مشترک است.

در حد الکتروستاتیک $(c \longrightarrow \infty)$، رابطه پاشندگی به شکل زیر در می‌آید:

$$\omega = \frac{\omega_{pe}}{\sqrt{2}}\left(1 + \frac{k_y v_{Fe}}{\sqrt{2}\omega_{pe}}\sqrt{1 + \frac{h^2 k_y^2}{4m^2 v_{Fe}^2}}\right) \qquad (15)$$

و در غیاب آثار کوانتومی، $(\hbar \to 0)$، رابطه پاشندگی حد پلاسمون - پلاریتون سطحی به شکل معادله زیر ساده می‌شود:

$$\omega = \frac{\omega_{pe}}{\sqrt{2}}\left(1 + \frac{k_y v_e}{\sqrt{2}\omega_{pe}}\right) \qquad (16)$$

2. ملاحظات انرژی

تحول فضا-زمانی انرژی سامانه، توسط نظریه پوئیتن‌تینگ و مطابق با رابطه زیر توصیف می‌شود:

$$\nabla.S + \partial_t u = -E_{\square}.J_{\square} \qquad (17)$$

که در آن S بردار پوئین‌تینگ (بردار چگالی توان متناظر با میدان الکترومغناطیسی) است و بصورت زیر تعریف می‌شود:

$$S = E \times H \qquad (18)$$

همچنین، u چگالی انرژی موج الکترومغناطیسی را توصیف می‌کند و با رابطه زیر بیان می‌شود:

$$u = \frac{1}{2}\left(E.D + H.B\right) \qquad (19)$$

با توجه به شکل 1، $\mathbf{E}_{\square}$ و $\mathbf{J}_{\square}$ به ترتیب تصویر E و J در صفحه فصل مشترک است و داریم:

$$E_{\square} = E_y \hat{Y} + E_z \hat{Z} \quad , \quad J_{\square} = J_y \hat{Y} + J_z \hat{Z} \qquad (20)$$

شارش انرژی در محیط پلاسما، توسط بردار پوئین‌تینگ تعیین می‌شود. بردار پوئیتن‌تینگ در هر سه امتداد فضا می‌تواند مؤلفه داشته باشد، اما در حد پلاسمون - پلاریتون سطحی، مؤلفه‌ی در امتداد عمود بر سطح میدان‌ها و در نتیجه بردار پوئیتن‌تینگ به طور نمایی افت می‌کند و به طور میانگین در طی یک دوره‌ی نوسان از بین می‌رود. اگر امتداد انتشار در فصل مشترک را در امتداد محور y ها در نظر بگیریم، مؤلفه‌ی در امتداد فصل مشترک بردار پوئیتن‌تینگ به صورت زیر خواهد شد:

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$$\langle S_y \rangle = \int_0^\infty S_y(x)\,dx = \frac{1}{2}\int \mathrm{Re}\left[E_z H_x - E_x H_z\right]$$

$$= \frac{1}{2}\int_0^\infty D_{2z} F_{2x} e^{2\alpha_p x}\,dx + \frac{4\pi eA}{2} F_{2z}\left[v_{Fe}^{2} - \frac{\hbar^2\left(\gamma_p^{2} - k_y^{2}\right)}{4m^2}\right]$$

$$\left(\frac{-\gamma_p}{\omega_p^{2} - \omega^2}\right)\int_0^\infty e^{-(\gamma_p+\alpha_p)}dx \qquad (21)$$

$$= \frac{D_{2z}F_{2x}}{\alpha_p} - \frac{D_{2x}F_{2z}}{\alpha_p}$$

$$-2\pi eAF_{2z}\left[v_{Fe}^{2} - \frac{\hbar^2\left(\gamma_p^{2} - k_y^{2}\right)}{4m^2}\right]\left(\frac{\gamma_p}{\gamma_p+\alpha_p}\right)\left(\frac{1}{\omega_p^{2}-\omega^2}\right)$$

چگالی انرژی الکترومغناطیسی در پلاسما را نیز می‌توان توسط رابطه زیر محاسبه کرد:

$$\left\langle u^{(p)} \right\rangle = \int_0^\infty u(x)\,dx = \int \frac{1}{2}\left[E.D + H.B\right]dx$$

$$= \int \frac{1}{2}\left(\varepsilon_0 E.E^{*} + \mu_0 B.B^{*}\right)dx$$

$$= \frac{1}{2}\varepsilon_0 D_2^{2}\int_0^\infty e^{-2\alpha_p x}dx + \frac{1}{2}\mu_0 F_2^{2}\int_0^\infty e^{-2\alpha_p x}dx \qquad (22)$$

$$+\frac{1}{2}\varepsilon_0\left(4\pi eA\right)\left[v_{Fe}^{2} - \frac{\hbar^2(\gamma_p^{2} - k_y^{2})}{4m^2}\right]^2 \frac{\gamma_p^{2} + k_y^{2}}{\left(\omega_p^2 - \omega^2\right)}\frac{1}{2\gamma_p^2}$$

با استفاده از معادلات (7) و (8) عبارت E.J را محاسبه می‌کنیم:

$$E.J = \left(\frac{m}{e}\frac{\partial v_1}{\partial t} + \frac{mv_{Fe}^{2}}{en_0}\right).\left(n_0 e v_1\right)$$

$$= \frac{m}{e}\frac{\partial v_1^{2}}{\partial t} + mv_{Fe}^{2}\nabla.\left(n\vec{v}_1\right) + \frac{mv_{Fe}^{2}}{2n_0}\frac{\partial}{\partial t}\left(n_1^{2}\right) \qquad (23)$$

با داشتن روابطی برای S, u و EJ، امکان بررسی شارش انرژی در پلاسما وجود دارد.

3. سرعت شارش انرژی

سرعت شارش انرژی از نسبت بردار پوئیتن‌تینگ و چگالی انرژی به صورت زیر به دست می‌آید:

$$v_E = \frac{\langle S\rangle}{\langle u\rangle} = \frac{D_{2z}F_{2x} - D_{2x}F_{2z}}{2\alpha_p} \qquad (24)$$

$$-2\pi eAF_{2x}\left[v_{Fe}^{2} - \frac{\hbar^2\left(\gamma_p^{2} - k_y^{2}\right)}{4m^2}\right]\frac{\gamma_p}{\left(\gamma_p+\alpha_p\right)\left(\omega_p^{2}+\omega^2\right)}$$

در نهایت می‌توانیم مقاومت ظاهری موج را می‌توان از نسبت مولفه‌ی عمودی میدان مغناطیسی (نسبت به امتداد شعاع) به مولفه‌ی عمودی میدان مغناطیسی به دست آورد:

$$\chi = \frac{E_\perp}{H_\perp} \qquad (25)$$

$$= \frac{\mu_0\sqrt{D_{2x}^{2} + D_{2z}^{2} + \left(4\pi eA\right)^2\left[v_{Fe}^{2} - \frac{\hbar^2\left(\gamma_p^{2} - k_y^{2}\right)}{4m^2}\right]\frac{\gamma_p}{\left(\omega_p^{2}+\omega^2\right)}}}{\sqrt{F_{2x}^{2} + F_{2z}^{2}}}$$

4. نتیجه‌گیری

انتقال انرژی از طریق امواج آکوستیکی در پلاسما کوانتومی مبحث مهم و کاربردی است که از جمله در قطعات مینیاتوری استفاده می‌شود. در این مقاله ملاحظات انرژی مربوط امواج آکوستیک در پلاسمای کوانتومی را بررسی کرده و معادلات حاکم بر آن را به دست آوردیم. سپس در ادامه، سرعت شارش انرژی و مقاومت ظاهری این نوع امواج را نیز محاسبه کرده و روابطی برای آن‌ها ارائه کردیم. صحت روابط بدست آمده را با به سمت صفر میل دادن $(\hbar \to 0)$ تحقیق کردیم.

مرجع‌ها

[1] Dendy, Richard O., *Plasma Physics: An Introductory Course*, Cambridge University Press (1995).

[2] Chen, Francis F. *Introduction to Plasma Physics*, Springer Science & Business Media (2012).

[3] مهرآمیز، احمد؛ شعبان سلیمانی، الهام، «پاشندگی امواج مغناطوآکوستیکی در یک پلاسمای کوانتومی»؛ مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران، جلد 18 ، شمارهٔ 2، تابستان 1397

[4] Casalino, Giuseppe, et al. "Experimental and numerical study of AISI 4130 steel surface hardening by pulsed Nd: YAG laser", *Materials* **12** 3136 (2019).

[5] Igbal Z, Ayub, M, et all " Energy behavior of spin electron cyclotron wave in spin polarized plasma", *Physics Letters A* **383** 2903 (2019).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی اثر اندازه دی الکتریک در مشخصه یابی پلاسمای هوا تخلیه الکتریکی با مانع دی الکتریک

دهقانی ، زهره ؛ خلیل زاده*، الناز؛ چخماچی، امیر

سازمان انرژی اتمی، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، پژوهشکده پلاسما و گداخت هسته ای

چکیده

*در این مقاله، به منظور بررسی پارامترهای پلاسمای غیرتعادلی، با استفاده از طیف سنجی نشر نوری، به مطالعه پلاسمای تولیدی بوسیله تخلیه با مانع دی الکتریک در فشار اتمسفر هوا پرداخته شده است. علاوه بر آن تاثیر ضخامت دی الکتریک از جنس کوارتز مورد استفاده، بر روی دمای الکترونی پلاسما مورد بررسی قرار گرفته است. با استفاده از روش طیف سنجی نشر نوری، گونه ها و رادیکال های آزاد تولیدی **از نوع نیتروژن و اکسیژن** در بازه طول موجی ۲۰۰- ۱۰۰۰ نانو متر در این سامانه مشاهده شده است. نتایج بدست آمده نشان می دهد که یکی از مهمترین پارامترهایی موثر بر خواص پلاسمای DBD، ضخامت دی الکتریک مورد استفاده در ساختار آن است. ساختار و اندازه دی الکتریک اثر قابل توجه روی دمای الکترون¬ها داشته و افزایش ضخامت دی الکتریک، باعث کاهش دمای الکترونی می شود.*

واژه های کلیدی: *پلاسمای تخلیه الکتریکی با مانع دی الکتریک، دمای الکترونی، طیف سنجی نشر نوری، پلاسمای فشار اتمسفر*

Investigation of dielectric size effect on the temperature electron of dielectric barrier discharge air plasma

Dehghani, Zohreh; Khalilzadeh*, Elnaz; Chakhmachi, Amir

The Plasma Physics and Fusion Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran, Iran

Abstract

In this paper, to investigate the parameters of non-equilibrium plasma, using optical emission spectroscopy, the dielectric barrier discharge air plasma at atmospheric pressure has been studied. In addition, the effect of quartz dielectric thickness on plasma electron temperature has been investigated. In this system, using optical emission spectroscopy, species and free radicals of nitrogen and oxygen in the wavelength range of 200-1000 nm have been observed. The results show that the dielectric thickness used in its structure is one of the most important parameters affecting the properties of DBD plasma. The structure and size of the dielectric have a significant effect on the electron temperature. As result, an increase in the dielectric thickness causes the reduction of the electron temperature.

***Keywords**: Dielectric barrier discharge plasma, Temperature electron, Optical emission spectroscopy, Atmospheric pressure plasma*

PACS No. ***(۵۲)***

مقدمه

امروزه انواع مختلف پلاسماها به دلیل خواص منحصر به فرد آن، راه حل جدیدی برای فائق آمدن به مشکلات پیش روی محققان در زمینه های مختلف از جمله در صنعت و پزشکی فراهم کرده است. این پلاسماها از جهت های مختلفی قابل طبقه بندی بوده که از نقطه نظر فشار ، به دو دسته ی کلی پلاسمای فشار پایین و پلاسمای فشار اتمسفری تقسیم می شوند. در حال حاضر از میان این دو دسته پلاسما، توجه بیشتر به پلاسمای فشار اتمسفری به دلیل سادگی و هزینه کم آن نسبت به پلاسمای فشار پایین است.

علاوه بر این نوع پلاسماها، اخیراً نیز توجهات جالب توجهی در فرآیندهای پلاسمای سرد در فشار اتمسفر صورت پذیرفته است. این نوع پلاسماها مانند تخلیه های الکتریکی با مانع دی الکتریک [۱،۲]، سوزن های پلاسمایی [۳]، و پلاسما جت میکرو مویرگی [٤]، به دلیل ویژگی هایشان می‌توانند امکان پردازش مداوم پلاسما در کاربردهای مختلفی را فراهم کند. پلاسمای سرد در بسیاری از کاربردها مانند اصلاح سطح پلیمرها [۵]، و غیرفعال کردن باکتری‌ها [٦] استفاده می شود. در این بین تخلیه با مانع دی الکتریک (DBD) اغلب به عنوان یک منبع پلاسمای غیر حرارتی

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

استفاده می‌شود که می تواند با گازهای مختلف در فشارهای بالا (تا فشار اتمسفر) کار کند.

همچنین چون پلاسماهای سرد برای تولید، نیاز به مواد و روش های شیمیایی ندارد، لذا در مواردی همچون اصلاح سطوح به صورت یکنواخت تری عمل خواهند کرد. این نوع پلاسماها به دلیل خصوصیت مهم پلاسمای سرد فشار اتمسفری یعنی غیر تعادلی بودنشان، نداشتن تعادل ترمودینامیکی محلی، داشتن الکترون های داغ، یون های سرد و گونه های خارجی، این امکان را فراهم می سازند تا از آن ها در پردازش مواد حساس به گرما و بافت های زنده در صنعت و پزشکی استفاده شود.

در این کار، دمای الکترونی در پلاسمای تخلیه الکتریکی با مانع دی الکتریک ، با استفاده از طیف سنجی نشر نوری، بدست آمد. علاوه بر آن، تاثیر ضخامت دی الکتریک از جنس کوارتز بر روی این پارامتر پلاسما مورد بررسی قرار گرفته است.

چیدمان آزمایش

چیدمان ساده ای از راه اندازی سیستم تخلیه الکتریکی صفحه‌ای با مانع دی الکتریک (DBD) در شکل (۱) نشان داده شده است.



شکل ۱ : چیدمان سیستم تخلیه الکتریکی صفحه ای با مانع دی الکتریک مورد استفاده.

پلاسما بین دو الکترود رسانا متصل به منبع AC ایجاد می شود. حداقل یکی از الکترودهای DBD با یک لایه دی الکتریک پوشیده شده که از تشکیل قوس پس از شکست جلوگیری می‌کند. تخلیه DBD معمولاً شامل تعداد زیادی میکرو کانال (رشته) با طول عمر کوتاه است که به طور تصادفی در کل منطقه مانع دی الکتریک توزیع می شوند. با وجود ولتاژ شکست بالا در گاز و در فشار اتمسفر (چند کیلوولت)، با وجود دی الکتریک، متوسط جریان الکتریکی کم است. سیستم متشکل از منبع تغذیه AC با ولتاژ متغیر ۵ kV تا ۲۰ kV و فرکانس بین ۲۰-۱۰ kHz می‌باشد که توسط سیم‌های پوشیده شده تفلون به الکترود مسی به قطر ۷ cm متصل می‌شود. الکترود بالایی به منظور تنظیم فاصله بین دو الکترود متحرک بوده و به دیواره محفظه از جنس پیرکس متصل است. دی الکتریک‌های مورد استفاده با ضخامت‌های ۱ mm و ۲ mm از جنس کوارتز می‌باشند. فاصله بین دو الکترود قابلیت تنظیم داشته و در این کار ۵ mm انتخاب می‌شود. تمامی آزمایش ها در دمای اتاق و فشار اتمسفر انجام می گیرد. علاوه بر آن برای تشکیل پلاسما در تمامی مراحل آزمایش از ولتاژ کاری ۷ kV و فرکانس ۱۵ kHz استفاده شده است.

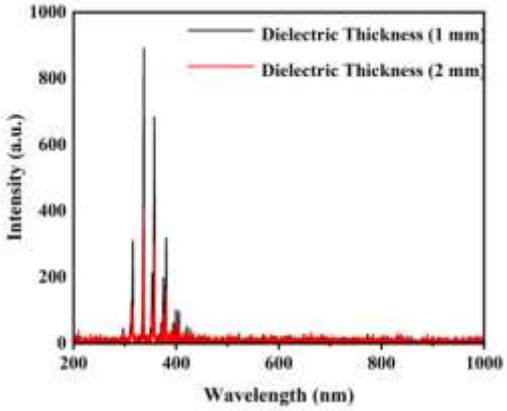
روش مشخصه یابی

- طیف سنجی نشر نوری

برای بدست آوردن دمای الکترونی پلاسمای تخلیه الکتریکی صفحه‌ای با مانع دی الکتریک از طیف سنج نشر نوری استفاده شده است. طیف سنج ساخته شده مدل V900 (محصول شرکت فناوران فیزیک نوین) با وضوح طیفی ۱ nm، در محدوده طیفی ۲۰۰ nm- ۱۱۰۰ برای اندازه گیری شدت نور نشری از پلاسمای هوا مورد استفاده قرار می‌گیرد. فیبر فوتو مولتی پلایر که پاسخ آن بین ۲۰۰ nm تا ۱۱۰۰ است، برای جمع‌آوری فوتون‌ها استفاده شده و سیگنال خروجی آن پس از تقویت به رایانه منتقل می‌شود. به منظور کالیبره کردن کل سیستم نوری از جمله فیبر نوری، از منبع نوری یک نمونه تک اتمی شناخته شده مانند لامپ‌های جیوه و هلیوم، استفاده می‌شود. نتایج کالیبراسیون برای اصلاح شدت خطوط طیفی برای محاسبه مربوطه استفاده می شود. پروب منفرد در نزدیکی محل تشکیل پلاسما و بین دو الکترود قرار می‌گیرد. علاوه بر آن برای جمع آوری بهتر داده های آزمایش از کولیماتور در فرآیند طیف سنجی استفاده می‌شود. در شکل (۲)، طیف نشری پلاسمای هوا در فشار اتمسفر، با استفاده از تخلیه الکتریکی با مانع دی الکتریک با ضخامت های ۱ mm و ۲ mm آورده شده است. با

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

استفاده از داده های NIST، در هر دو طیف بدست آمده از این سیستم، در محیط هوا گونه های برانگیخته نیتروژن و اکسیژن در تخلیه هوا در بازه ۳۰۰-۴۵۰ nm قابل مشاهده هستند.



شکل ۲: طیف نشری پلاسمای هوا در فشار اتمسفر، با استفاده از تخلیه الکتریکی با مانع دی الکتریک با ضخامت های ۱ و ۲ میلی متر.

علاوه بر آن دیده می شود که با افزایش ضخامت دی الکتریک شدت برخی از خطوط طیفی در طیف بدست آمده کاهش می یابد که نشان دهنده تاثیر ضخامت دی الکتریک بر روی پارامترهای پلاسما می باشد.

- محاسبه دمای الکترونی و نتایج آن

در تخمین دمای الکترونی با استفاده از روش طیف سنجی نشر نوری و بدون استفاده از پهن شدگی‌ها، لازم است که پلاسمای مورد نظر در تعادل ترمودینامیکی موضعی و یا شبه تعادل ترمودینامیکی موضعی باشد. در نتیجه باید، فرآیند برخورد بر تابش غالب باشد که در این شرایط نیاز به چگالی الکترونی بالایی است. یک معیار پیشنهادی توسط مکگیل بیان می شود که برای آن که چگالی بحرانی الکترون، شرایط تعادل ترمودینامیکی را در محیط فراهم کند بایستی برخورد حداقل ۱۰ برابر فرآیند تابش باشد و از معیار مکگیل پیروی کند (معادله ۱)

$$n_e \succ 10^{13} T_e^{1/2} \Delta E^3 [ev] \Leftrightarrow n_e \succ 10^{18} cm^{-3} \qquad (۱)$$

در شرایط تعادل ترمودینامیکی برای محاسبه دما می توان از رابطه بولتزمن استفاده کرد. در این روش از توصیف آماری ساها بولتزمن استفاده می شود که برای گذار از تراز k به تراز i نوشته شده است:

$$\ln\left(\frac{I_{ki}\lambda_{ki}}{A_{ki}g_k}\right) = \frac{-E_k}{k_B T} + \ln\left(\frac{hc}{4\pi}\frac{N_0}{U(T)}\right) \qquad (۲)$$

که در آن که در آن λ_{ki} طول موج بر حسب نانومتر، I_{ki} شدت اندازه گیری شده بر حسب (a.u)، A_{ki} احتمال گذار در حد $10^8\ \mathrm{sec}^{-1}$، g_k وزن آماری می باشند. در نهایت این رابطه را می توان به صورت معادله (۳) نوشت [۷]

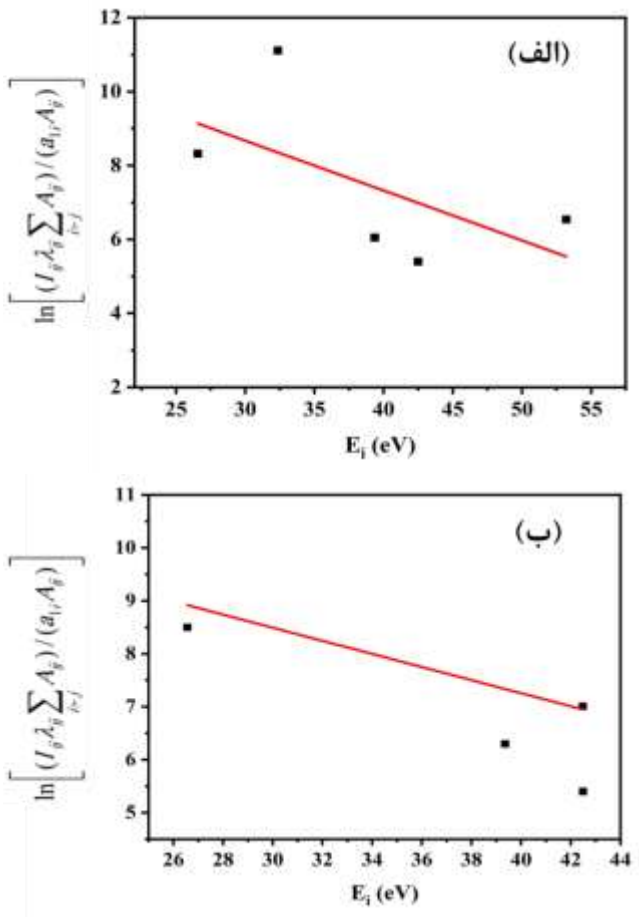
$$\ln\left(\frac{I_{ki}\lambda_{ki}}{A_{ki}g_k}\right) = \frac{-E_k}{k_B T} + C \qquad (۳)$$

در رابطه (۳)، C ثابت برای یک گونه اتمی معین است. روش نمودار بولتزمن، خطاهای ناشی از پلاسمای غیر حرارتی را کاهش می دهد. چرا که چندین خط طیفی با انرژی های تحریک مختلف در این روش استفاده می‌شود.

بنابراین، دمای الکترون را می‌توان از شیب نمودار بولتزمن بدست آورد. شکل ۳ نمودار بولتزمن را نشان می‌دهد که از شدت های انتشار چندین خط طیفی هوا، با انرژی‌های تحریک آستانه متفاوت در رسم آن استفاده شده است. این خطوط طیفی، حاصل پلاسمای هوا با استفاده از تخلیه الکتریکی با مانع دی الکتریک با ضخامت‌های ۱ mm و ۲ mm می باشند. همانطور که مشاهده می شود و با استفاده از شیب نمودار بولتزمن که نشان دهنده دمای الکترونی پلاسما است، با افزایش ضخامت دی الکتریک از ۱ mm به ۲ mm ، دمای الکترونی از ۳/۹ eV به ۳/۱ eV کاهش می‌یابد.

یکی از مهمترین پارامترهایی موثر بر خواص پلاسمای DBD، ضخامت دی الکتریک مورد استفاده در ساختار آن است. با افزایش ضخامت دی الکتریک، مقاومت الکتریکی مدار خارجی افزایش یافته که منجر به کاهش ولتاژ تخلیه می‌شود. بر این اساس، تخلیه در سراسر شکاف نیز ضعیف می‌شود. بنابراین با افزایش ضخامت دی الکتریک دمای الکترونی کاهش می یابد.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل ۳: نمودار بولتزمن خطوط طیفی، حاصل پلاسمای هوا با استفاده از تخلیه الکتریکی با مانع دی الکتریک با ضخامت های (الف) ۱ mm و (ب) ۲ mm.

پدیده ضعیف شدن قدرت تخلیه و کاهش پلاسمای تخلیه با افزایش ضخامت دی الکتریک را می توان از سه جنبه توضیح داد. نخست اینکه با افزایش ضخامت دی الکتریک، ظرفیت معادل لایه دی الکتریک کاهش یافته و بارهای انباشته شده در سطح لایه دی‌الکتریک کم می‌شوند . هنگامی که تخلیه پالس منفی، در نیم سیکل بعدی اتفاق می‌افتد، بارهای کمتری در سطح لایه دی‌الکتریک در شکاف گاز آزاد گردیده و در فرآیند تخلیه شرکت می‌کنند. بنابراین افزایش ضخامت دی الکتریک می‌تواند منجر به کاهش چگالی الکترون‌ها و کاهش تعداد یون‌ها و مولکول‌های برانگیخته شود. دوم، هنگامی که ولتاژ پالس ثابت نگه داشته می‌شود، افزایش ضخامت دی الکتریک باعث کاهش ولتاژ تخلیه در شکاف گاز می‌شود که همین امر منجر به کاهش میدان الکتریکی اولیه یا کاهش میدان الکتریکی E/N در پلاسمای تخلیه می‌گردد (که E میدان الکتریکی و N چگالی تعداد ذرات است). از این رو، نسبت کمتری چگالی الکترون با انرژی بالا را می‌توان تولید کرد و انرژی متوسط الکترون‌ها نیز کاهش می‌یابد. بر این اساس، سرعت تحریک و تفکیک الکترونیکی اتمی یا مولکولی در فرآیندهای پلاسماشیمیایی نیز کاهش می‌یابد.

نتیجه گیری:

در این کار، دمای الکترونی در پلاسمای تخلیه الکتریکی با مانع دی الکتریک ، با استفاده از طیف سنجی نشر نوری، بدست آمد. علاوه بر آن، تاثیر ضخامت دی الکتریک از جنس کوارتز بر روی این پارامتر پلاسما مورد بررسی قرار گرفت. نتایج بدست آمده نشان دادند که یکی از مهمترین پارامترهایی موثر بر خواص پلاسمای DBD، ضخامت دی الکتریک مورد استفاده در ساختار آن است. با افزایش ضخامت دی الکتریک، مقاومت الکتریکی مدار خارجی افزایش یافته که منجر به کاهش ولتاژ تخلیه می‌شود. بر این اساس، تخلیه در سراسر شکاف نیز ضعیف می‌شود. بنابراین با افزایش ضخامت دی الکتریک دمای الکترونی کاهش می یابد.

مرجع‌ها:

[1]Yang L Q, Chen J R, Gao J L, Applied Surface Science, 255: 4446, 2009.
[2]Chiang M H, Rocha V, Koga-Ito C Y,, Surface & Coatings Technology, 204
[3]M.Backer; . Thesis submitted to Aachen University of Applied Science 2007.
[4] Hammad R.Humud ,Ahamad S.Wasfi,Wafaa Abd Al-Razaq, Journal of physics,vol.10,No.16,pp.40-48, 2013.
[5] T.P.Kasih , dissertation submitted to graduate school of engineering Gunma University for degree of doctor of Engineering ,2007.
[6]G.Fridman, a thesis submitted to the faculty of Drexel University in partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Philosophy September ,2008.
[7] Qayyum, A., Zeb, S., Naveed, M.A., Ghauri S. A. and Zakaullah M.. Plasma Devices and Operations, 15 (2) 87-93, (2007)

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

اثر حضور میدان مغناطیسی ناشی از آهن ربای دائمی روی دمای پلاسمای ناشی از منبع میکروموج در فشار پایین

دهقانی ، زهره ؛ خلیل زاده، الناز*؛ رضوی نیا، نرگس ؛ چخماچی، امیر

سازمان انرژی اتمی، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، پژوهشکده پلاسما و گداخت هسته ای

چکیده

در این مقاله دمای الکترون ها در یک پلاسمای میکروموج آرگون با فرکانس ۲/٤٥ GHz در حضور و بدون حضور میدان مغناطیسی با استفاده از بیناب نمایی نشر نوری محاسبه و مقایسه شده است. از آهنرباهای دایمی جهت محصور سازی پلاسما و تامین میدان مغناطیسی در مکانیزم تشدید سیکلوترونی الکترونی استفاده شده و به کمک شبیه‌سازی، چیدمان مناسب برای تولید میدان مغناطیسی مورد نظر بدست آمده است. با استفاده از فرمول بولتزمن اصلاح شده دمای الکترون‌ها محاسبه شده است. نتایج بدست آمده نشان می دهد میدان مغناطیسی اثر قابل توجه روی دمای الکترون‌ها داشته و به مقدار ۱۲۵ درصد افزایش الکترون‌ها را در پی دارد. به عبارتی دمای الکترون‌ها تحت تاثیر میدان مغناطیسی ناشی از آهن ربای ثابت از ۰,٦۲ الکترون ولت به ۱,٤ الکترون ولت رسیده است. همچنین نشان داده می‌شود طبق انتظار با کاهش فشار، دمای الکترون‌ها افزایش می‌یابد که این صحت آزمایش و نتایج بدست آمده را تایید می‌کند.

واژه های کلیدی: *پلاسمای منبع میکروموج، آهن ربای دائمی، تشدید سیکلوترونی الکترونی، دمای پلاسما*

Effect of the presence of a magnetic field due to a permanent magnet on the temperature of the microwave plasma at low pressure

Dehghani, Zohreh; Khalilzadeh, Elnaz*; Razavinia, Narges; Chakhmachi, Amir

The Plasma Physics and Fusion Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran, Iran

Abstract

In this paper, the temperature of electrons in an argon microwave plasma with a frequency of 2.45 GHz in the presence and absence of a magnetic field is calculated and compared using optical emission spectroscopy. Permanent magnets are used to supply the magnetic field in the electron cyclotron resonance mechanism, and with the help of simulation, a suitable arrangement has been obtained. The results show that the magnetic field has a significant effect on the electrons temperature and leads to a 125% increase in the temperature of the electrons. In other words, the temperature of the electrons has increased from 0.62 eV to 1.4 eV due to the magnetic field caused by the permanent magnet. It is also shown that as the pressure decreases, the temperature of the electrons increases as expected, which confirms the accuracy of the results obtained.

Keywords: *Microwave plasma, Electron cyclotron resonance, Permanent magnets, Plasma temperature*
PACS No. ***(٥٢)***

مقدمه

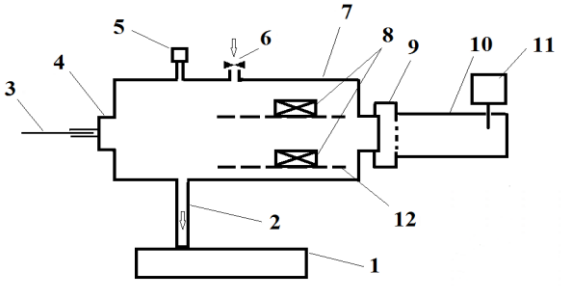
امروزه، پلاسماهای غیر حرارتی به دلیل توانایی آن در ارائه غلظت‌های بالایی از گونه‌های فعال شیمیایی بدون نیاز به دمای گاز بالا، در کاربردهای مختلف صنعتی اهمیت قابل‌توجهی یافته‌اند [۱و۲]. یکی از انواع تخلیه های الکتریکی برای تولید پلاسمای غیرحرارتی، تخلیه با استفاده از میکروموج می باشد. طول‌موج های مورد استفاده میکروموج ها در محدوده میلی متر تا چند ده سانتی متر بوده و فرکانس ۲/٤٥ گیگا هرتز بیشترین استفاده را دارد. از آنجایی که فرکانس برخورد الکترون ها نزدیک به فرکانس میکروموج است، مقدار جذب توان در مایکروویو بالا بوده و باعث می‌شود نسبت یونیزاسیون و چگالی پلاسما بالاتری در مقایسه با منابع دیگر بدست آید. با این حال، عملکرد پلاسمای میکروموج را می توان به روش دیگری مانند اعمال میدان مغناطیسی بهبود بخشید[۳]. این باعث افزایش دمای پلاسما می شود. در واقع میدان مغناطیسی اعمال شده می‌تواند الکترون‌ها را وادار به چرخش در اطراف خطوط شار مغناطیسی کند و فرصت‌های برخورد بیشتری با ذرات دیگر ایجاد کند. در نتیجه انرژی میکروموج بیشتری در پلاسما رسوب می کند. در این حالت که فرکانس

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

چرخش الکترون برابر با میکروموج باشد، پلاسما در حالت رزونانس سیکلوترون الکترون قرار دارد و انرژی جذب شده توسط پلاسما به حداکثر نزدیک می شود [٤]. معمولا، میدان مغناطیسی خارجی از طریق آهنرباهای دائمی یا کویل‌های الکترومغناطیسی که خارج هر ساختار قرار می‌گیرند اعمال می شوند. یکی از اشکالات کویل‌های الکترومغناطیسی، استفاده از الکترومگنت‌ها و هزینه‌های مربوط به سیم‌پیچ‌ها ، توان مصرفی و خنک کردن کویل‌ها است. استفاده از آهنربای دائمی سبب کاهش قابل توجه هزینه‌ها می شود. در این مقاله، از چیدمان آهنرباهای دایمی جهت محصور سازی پلاسما و تامین میدان مغناطیسی در مکانیزم تشدید سیکلوترونی الکترونی در حضور امواج میکروموج استفاده شده است. دمای الکترونها در یک پلاسمای میکروموج آرگون با فرکانس GHz ۲/٤٥ در حضور و بدون حضور میدان مغناطیسی با استفاده از بیناب نمایی نشر نوری محاسبه و مقایسه شده است.

چیدمان آزمایش

در این آزمایش، منبع تولید توان جهت تولید پلاسما یک مگنترون با توان خروجی ۱کیلو وات بوده، که می‌تواند امواج میکروموج با فرکانس GHz ۲/٤٥ تولید نماید. این امواج تولیدی از طریق یک موجبر استاندارد در باند cm ۱۳ با عنوان تجاری WR-340، به محفظه خلاء راکتور منتقل می شوند. البته انتقال به محفظه از طریق یک پنجره بروسیلیکاتی انجام پذیرفته و موجبر با یک عایق فیبر استخوانی از محفظه خلاء راکتور ایزوله الکتریکی گردیده است. همچنان که در بالا نیز ذکر شده امواج میکرو موج به حجم مابین دو آهنربای دایمی که در محفظه خلاء راکتور قرار دارند تابش می شود. این دو آهنربای دایمی هریک توانایی تولید میدان مغناطیسی حداکثر G ۱۰۰۰ را دارند.



شکل ۱: شماتیک راکتور پلاسمایی

در شکل (۱) شماتیکی از راکتور پلاسمایی که طراحی و ساخته شده، به همراه اجزاء تشکیل دهنده آن آورده شده است. مطابق شکل(۱) اجزاء راکتور مورد نظر عبارتند از : ۱. پمپ خلاء توربو، ۲. خروجی محفظه به پمپ، ۳. فیبر نوری اسپکترومتر، ٤. پنجره بروسیلیکاتی دید محفظه خلاء راکتور، ۵. پیچ خلاء،٦.. ورودی و تزریق گاز به همراه شیرسوزنی، ۷. محفظه خلاء راکتور، ۸. آهنربا های دایمی، ۹. نجره بروسیلیکاتی دید محفظه خلاء راکتور به همراه عایق فیبر استخوانی، ۱۰. موجبر، ۱۱. مگنترون، ۱۲. نگهدارنده های آهنرباهای دایمی. برای دست یابی به مکانیزم تشدید سیکلوترنی الکترونی، نیاز به میدان مغناطیسی G ۸۷٤/۸ می باشد. بنابراین برای رسیدن به طرز قرارگیری آهنرباها و پیدا کردین بهترین چیدمان از نرم افزار کامسول جهت شبیه‌سازی مساله استفاده می کنیم. حالت های مختلف بررسی شده و سطوح شار مغناطیسی حاصل از آهنرباهای دائمی با هم مقایسه شدند. در نهایت بهترین چیدمان، قرار گرفتن آهن رباها به صورت عمودی در امتداد محفظه چنبره (که در جهت Z می باشد) به فاصله cm ۳,۳ از یکدیگر بدست آمد.

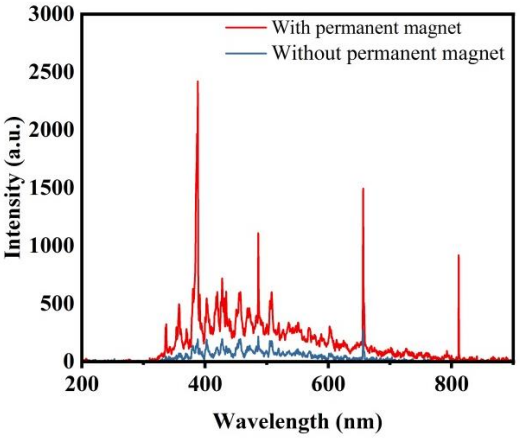
روش مشخصه یابی

- طیف سنجی نشر نوری

برای بدست آوردن دمای پلاسمای میکروموج آرگون با فرکانس GHz ۲/٤٥ در حضور و بدون حضور میدان مغناطیسی از بیناب نمایی نشر نوری استفاده شده است. طیف سنج ساخته شده مدل V900 (محصول شرکت فناوران فیزیک نوین) با وضوح طیفی nm ۱، در محدوده طیفی nm ۲۰۰– ۱۱۰۰ برای اندازه گیری شدت نور نشری از پلاسمای آرگون مورد استفاده قرار می گیرد. فیبر فوتو مولتی پلایر که پاسخ آن بین nm ۲۰۰ تا ۹۰۰ است، برای جمع‌آوری فوتون‌ها استفاده می‌شود و سیگنال خروجی آن پس از تقویت به رایانه منتقل می‌شود. به منظور کالیبره کردن کل سیستم نوری از جمله فیبر نوری، از منبع نوری یک نمونه تک اتمی شناخته شده مانند لامپ‌های جیوه و هلیوم، استفاده می شود. نتایج کالیبراسیون برای اصلاح شدت خطوط طیفی برای محاسبه مربوطه استفاده می شود. پروب منفرد روبروی پنجره در محور ناحیه ای

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

که پلاسمای میکروموج تشکیل شده است و قرار می گیرد. طیف بدست آمده از پلاسمای میکروموج شامل گونه های آرگون می باشد. آرگون اتمی در خطوط طیفی کمتر از ۴۰۰nm و گستره nm ۸۰۰-۷۰۰ در همه پلاسما مشاهده می شود.



شکل ۲: طیف نشری پلاسمای آرگون ۲/۴۵ GHz در فشار 10^{-3} mbar ۵/۴، درحضور و بدون حضور میدان مغناطیسی

طیف نشری پلاسمای آرگون ۲/۴۵GHz در فشار mbar 10^{-3}*۵/۴، درحضور و بدون حضور میدان مغناطیسی در شکل۲ آورده شده است. خطوط طیفی برجسته در طیف با استفاده از داده های NIST شناسایی و برچسب گذاری شده اند.

- محاسبه دمای الکترونی و نتایج آن

در طی فرآیندهای موجود در پلاسمای میکروموج، الکترون‌های موجود در پلاسمای میکروموج از تابش های الکترومغناطیسی تشکیل شده، انرژی کسب کرده و بخشی از انرژی خود را از طریق برخورد به ذرات گاز منتقل می کنند. این برخوردها بسته به انرژی الکترون های فرودی ممکن است کشسان یا غیرکشسان باشند. برخی از اتم ها با برخوردهای غیرکشسان به حالت های انرژی بالاتر رفته که متعاقب آن واپاشیده شده و فوتون های مشخصه ساطع می کنند. شدت این فوتون‌های مشخصه اطلاعاتی را در مورد چگالی جمعیت حالت بالایی گونه‌های ساطع‌کننده و همچنین توزیع انرژی الکترون ها که انرژیشان در اثر فرآیند برخورد الکترونی تغییر می کند، فراهم می‌نماید [۵]. در تخمین دمای الکترونی با استفاده از روش طیف سنجی نشر نوری و بدون استفاده از پهن شدگی‌ها، لازم است که پلاسمای مورد نظر در تعادل ترمودینامیکی موضعی و یا شبه تعادل ترمودینامیکی موضعی باشد. در نتیجه باید، فرآیند برخورد بر تابش غالب باشد که در این شرایط نیاز به چگالی الکترونی بالایی است. یک معیار پیشنهادی توسط مکگیل بیان می شود که برای آن که چگالی بحرانی الکترون، شرایط تعادل ترمودینامیکی را در محیط فراهم کند بایستی برخورد حداقل ۱۰ برابر فرآیند تابش باشد و از معیار مکگیل زیر پیروی کند

$$n_e \succ 10^{13} T_e^{1/2} \Delta E^3 [ev] \Leftrightarrow n_e \succ 10^{18} cm^{-3} \qquad (۱)$$

در شرایط تعادل ترمودینامیکی برای محاسبه دما می توان از رابطه بولتزمن استفاده کرد. در این روش از توصیف آماری ساها بولتزمن استفاده می شود که برای گذار از تراز k به تراز i نوشته شده است:

$$\ln\left(\frac{I_{ki}\lambda_{ki}}{A_{ki}g_k}\right) = \frac{-E_k}{k_B T} + \ln\left(\frac{hc}{4\pi}\frac{N_0}{U(T)}\right) \qquad (۲)$$

که در آن λ_{ki} طول موج بر حسب نانومتر، I_{ki} شدت اندازه گیری شده بر حسب (a.u)، A_{ki} احتمال گذار در حد $10^8\ \sec^{-1}$، g_k وزن آماری می باشند. در نهایت این رابطه را می توان به صورت زیر نوشت [۶]

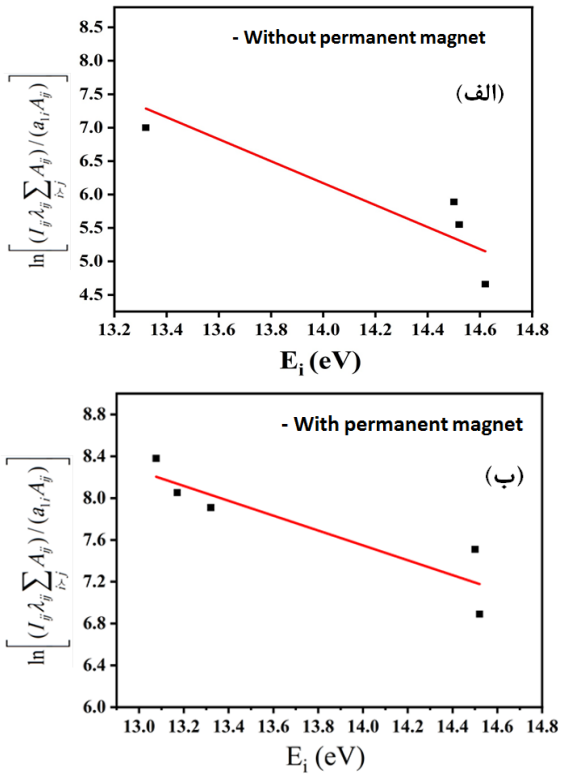
$$\ln\left(\frac{I_{ki}\lambda_{ki}}{A_{ki}g_k}\right) = \frac{-E_k}{k_B T} + C \qquad (۳)$$

در رابطه (۳)، C ثابت برای یک گونه اتمی معین است. روش نمودار بولتزمن، خطاهای ناشی از پلاسمای غیر حرارتی را کاهش می دهد. چراکه چندین خط طیفی با انرژی های تحریک مختلف در این روش استفاده می شود. از آنجایی در پلاسمای تابشی کم فشار، چگالی الکترونی در حدود $10^{9}\ cm^{-3}$ تا $10^{13} cm^{-3}$ می باشد، روش مرسوم نمودار بولتزمن در تعیین دمای الکترونی نادرست است زیرا انحراف چگالی اتم یا یون در سطوح برانگیخته از توزیع بولتزمن وجود دارد. در این حالت، تحریک مستقیم از حالت پایه با واپاشی تابشی فرآیند غالب در افزایش و کاهش جمعیت حالت های برانگیخته خواهد بود. طبق نتایج فوجیموتو، تعادل کرونا، فرآیند اولیه در پلاسماهای کم فشار و کم چگالی است.[۸] گوردیلو-وازکز و همکاران [۹] مدل کرونا را بررسی کردند و فرمول بولتزمن اصلاح شده را بر مبنای مدل زیر ارائه دادند [۷].

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

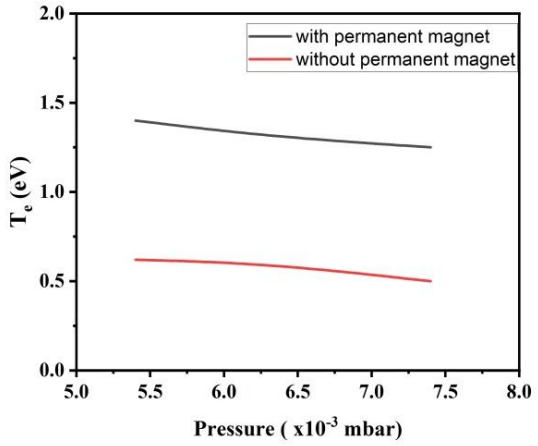
$$\ln\frac{I_{ij}\lambda_{ij}\sum_{i>j}A_{ij}}{A_{ij}a_{1i}} = -\frac{E_{1i}}{kT_e} + C \qquad (٤)$$

بنابراین، دمای الکترون را می‌توان از شیب نمودار بولتزمن اصلاح شده بدست آورد. شکل ۳ نمودار بولتزمن را نشان می‌دهد که از شدت های انتشار چندین خط طیفی آرگون، با انرژی‌های تحریک آستانه متفاوت در رسم آن استفاده شده است. این خطوط طیفی، حاصل پلاسمای آرگون در فشار mbar $۱۰^{-۳}\times$ ۵/٤، در حضور و بدون حضور میدان مغناطیسی می باشد.



شکل ۳: نمودار بولتزمن اصلاح شده خطوط طیفی، حاصل پلاسمای آرگون ۲/٤۵ GHz در فشار mbar $۱۰^{-۳}\times$ ۵/٤، (الف) بدون حضور میدان مغناطیسی و (ب) با حضور میدان مغناطیسی

در این شکل، دمای الکترونی پلاسما بدون میدان مغناطیسی در حدود ۰/٦۲ eV است، این در حالی است که در حضور میدان مغناطیسی این دما به حدود ۱/٤ eV می رسد. در ادامه، در شکل ٤، نمودار تغییرات دمای الکترونی پلاسمای میکروموج در حضور و بدون حضور میدان مغناطیسی بر حسب تغییرات فشار آورده شده است.



شکل ٤: نمودار تغییرات دمای الکترونی پلاسمای میکروموج ، با و بدون میدان مغناطیسی بر حسب تغییرات فشار

نتیجه گیری:

اثر حضور میدان مغناطیسی ناشی از آهن ربای دائمی روی دمای پلاسمای کم فشار ناشی از منبع میکروموج بررسی شد. نتایج نشان دهنده افزایش محسوس و ۱۲۵ درصد دمای الکترونها در حضور میدان مغناطیسی می باشد. همچنین مطابق انتظار با افزایش فشار، دمای الکترونی کاهش می یابد. این پدیده، به دلیل کاهش میانگین انرژی جنبشی با کاهش میانگین مسیر آزاد و برخوردهای مکرر بین الکترون ها ناشی از افزایش فشار است. با توجه به وابستگی انرژی جنبشی متوسط به دما، دمای الکترونی نیز کاهش می یابد.

مرجع ها:

[1] Chang, J. S. *Sci. Technol. Adv. Mater.* **2001**, *69*, 571.
[2] Urashima, K.; Chang, J. S. *IEEE Trans. Dielectr. Electtr. Insul.* **2000**, *7*, 602.
[3] R. L. Stenzel, J. M. Urrutia, C. T. Teodorescu-Soare, C. Ionita, and R. Schrittwieser, Phys. Plasmas 20, 083503 (2013).
[4] D. D. Blackwell, T. G. Madziwa, D. Arnush, and F. F. Chen, Phys. Rev. Lett. 88, 145002 (2002).
[5] Bibinov, N., Halfmann, H. and Awakowicz, P.. PSST, 17 (3) 035004. 15, (2008).
[6] Qayyum, A., Zeb, S., Naveed, M.A., Ghauri S. A. and Zakaullah M.. Plasma Devices and Operations, 15 (2) 87-93, (2007)
[7] Niu Tian-Ye, Cao Jin-Xiang, and Liu Lei, Chinese Physics, Vol 16 No 9, September (2007)

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی عمق نفوذ الکترون‌های گریزان در لیمیتر تنگستن در توکامک ها

عطایی سرشت، لاله[۱] ؛ عبدی، محمد رضا[۱]؛ پورشهاب، بنفشه[۲]؛ رسولی، چاپار [۲]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه اصفهان ، خیابان هزار جریب ، اصفهان

[۲] پژوهشکده پلاسما و گداخت هسته ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، انتهای خیابان کارگر شمالی ، تهران

چکیده

در میان محدودیت های طراحی اجزای مجاور با پلاسما، الکترون‌های گریزان یک نگرانی عمده محسوب می‌شوند زیرا این الکترون‌ها با تخلیه و رسوب جایگزیده انرژی بر روی اجزای مجاور به پلاسما سبب ایجاد آسیب بر این اجزا می‌گردند بنابراین دانستن مکانیسم برهمکنش الکترون‌های گریزان با دیواره محفظه خلاء، لیمیتر، دایورتور و سایر اجزای مجاور با پلاسما و نحوه رسوب انرژی حاصل از آنها از اهمیت به سزایی برخوردار است. در این تحقیق عمق نفوذ الکترون‌های گریزان و رسوب انرژی ناشی از آنها بر روی ماده تنگستن که یکی از نامزدهای اصلی برای ساختار سازنده دیواره اول و لیمیتر در توکامک‌هایی مانند ایتر[۱] و دمو[۲] مطرح است، بررسی گردیده است. طی شبیه سازی های انجام شده با کد مونت کارلو جینت پارامترهای مذکور برای انرژی های 100keV، 0.5MeV، 1MeV و 3MeV محاسبه شده و نتایج نشان داد که با افزایش انرژی الکترونهای تابش کننده، میزان عمق نفوذ و رسوب انرژی در هدف تنگستن افزایش می یابد. همچنین به تناسب افزایش انرژی الکترونها، بیشینه رسوب انرژی از لایه های سطحی به لایه های عمقی انتقال می یابد.

واژه های کلیدی: *الکترون گریزان، رسوب انرژی، عمق نفوذ، اجزای مجاور با پلاسما، لیمیتر ، تنگستن*

Investigation of penetration depth of runaway electrons in tungsten limiter

Ataeiseresht, Laleh[1]; Abdi, Mohamadreza[1]; Pourshahab Banafsheh [2]; Rasuli, Chapar[2]

[1] Department of Physics, University of Isfahan, Isfahan,
2 Plasma and Fusion Research School, NSTRI, AEOI

Abstract

From limitations of plasma facing components design, runaway electrons are considered as a main concern. Because these electrons by discharging and localized deposit energy on plasma facing components cause damages on theme. Therefore, it is so important to know the mechanism of interaction of runaway electrons with the vacuum chamber wall, limiter, diverter and other plasma facing components and how the resulting energy is deposited. In this paper, the penetration depth of runaway electrons and their energy deposition on tungsten, as one of the main candidates for the structure of the first wall and limiter in tokamaks such as ITER and DEMO, has been investigated. Since the simulations performed with the Monte Carlo Geant code, the mentioned parameters for 100keV, 0.5MeV, 1MeV and 3MeV energies were calculated and the results showed that with increasing the energy of the radiating electrons, the penetration depth and energy deposition in the tungsten target, increases. Also, in proportion to the increase in electron energy, the maximum energy deposition is transferred from the surface layers to the deep layers.

***Keywords**: runaway electron, energy deposit, penetration depth, plasma facing components, limiter, tungsten*

PACS No. 52

[1] ITER
[2] DEMO

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مقدمه

در میان بسیاری دیگر از محدودیت‌های طراحی اجزا در مجاورت پلاسما، الکترون‌های گریزان، یک نگرانی عمده محسوب می‌شوند، زیرا بسیاری از آسیب‌های دیواره اول در توکامک‌های موجود به دلیل تولید ستونی از الکترون‌های نسبیتی انرژی بالا در فاز فرونشانی جریان پلاسما و برخوردهای مخرب آنها با مواد دیواره ایجاد می‌شود [۱].

تولید الکترون‌هایی که به "الکترون گریزان[1]" موسوم هستند، زمانی که نیروی اصطکاک حاصل از برخوردهای کولنی روی آنها کوچکتر از نیروی شتاب‌دهی ناشی از میدان الکتریکی چنبره‌ای توکامک باشد، آغاز می‌گردد. در لحظات گسیختگی جریان، دمای پلاسما به طور ناگهانی به حدود دمای ۵-۲۰۰ eV افت می‌کند. بنابراین مقاومت الکتریکی پلاسما تا حد زیادی افزایش می‌یابد که سبب افزایش ولتاژ حلقه چنبره‌ای در طی فاز فرونشانی جریان می‌گردد. در این صورت الکترون‌های پلاسما، بوسیله میدان الکتریکی چنبره‌ای در طی گسیختگی‌ها شتاب می‌گیرند و به محدوده انرژی‌های نسبیتی رسیده و با ترک تابع توزیع به الکترون‌های گریزان تبدیل می‌شوند [۲]. اگرچه رخداد الکترون‌های گریزان از دیدگاه فیزیکی جالب و مهیج است، اما این پدیده برای توکامک‌های بزرگ مانند ایتر می‌تواند بسیار ویرانگر باشد زیرا با القای میدان‌های الکتریکی بزرگ در لحظات گسیختگی جمعیت الکترون‌های گریزان به صورت بهمنی افزایش یافته و سهم اعظم جریان پلاسما را به خود اختصاص می‌دهند. این مسئله در توکامک‌های اندازه متوسط و بزرگ که غالباً جریان‌هایی از مرتبه مگاآمپر تولید می‌کنند بسیار حائز اهمیت بوده و تبدیل این میزان جریان به جمعیتی از الکترون‌های گریزان، به معنای یک خطر بالقوه برای وقوع تنش‌های مکانیکی و بارهای گرمایی عظیم بر ساختار توکامک، در لحظات وقوع گسیختگی می‌باشد.

بنابراین مهمترین دلیل برای کنترل این نوع جریان‌ها این است که ستون الکترون‌های گریزان در لحظات برخورد، انرژی خود را به صورت موضعی بر روی دیواره و ادوات مجاور با پلاسما تخلیه می کند و این امر باعث وقوع آسیب‌های جدی بر روی این اجزا می‌گردد [۳و۴]. بنابراین، برآورد انرژی منتقل شده توسط الکترون‌های گریزان به مواد سازنده محفظه خلاء در راکتورهای همجوشی از اهمیت به سزایی برخوردار است. آسیب‌هایی همچون ذوب‌شدگی، خوردگی و شکست اجزای مجاور با پلاسما در اثر برخورد با الکترون‌های گریزان در مراجع متعددی گزارش شده است [۱و۲]. یکی از مهمترین اجزایی که در معرض این برخوردها قرار دارد لیمیتر است که به منظور برش لبه پلاسما و حفظ فاصله آن از دیواره و در نتیجه کنترل ناخالصی‌ها، در داخل محفظه خلاء توکامک‌ها نصب می‌گردد. در این مقاله عمق نفوذ الکترون‌های گریزان در هدف‌هایی از جنس تنگستن به عنوان یکی از مواد انتخابی اصلی برای ساخت لیمیترها، با استفاده از کد مونت کارلوی جینت[2] مورد بررسی قرار گرفته است.

روش کار

در این مطالعه کد مونت کارلوی جینت برای محاسبه پروفایل رسوب انرژی داخل اجزای مجاور با پلاسما و همچنین بررسی عمق نفوذ الکترون‌ها در ماده هدف مورد استفاده قرار گرفته است. جینت ٤ یک برنامه مونت کارلو است که برای شبیه سازی ردیاب‌های فیزیک با انرژی بالا در سرن[3] استفاده می‌شود. جینت ٤ فرآیندهای الکترومغناطیسی را برای الکترون‌ها و فوتون‌های دارای انرژی از صدها کیلو الکترون ولت keV تا چند صد ترا الکترون ولت TeV محاسبه می‌کند. همچنین ابزار برنامه نویسی جینت ٤ یک کتابخانه دقیق از فرآیندهای فیزیکی را تأمین می‌کند که شامل برهم‌کنش‌های ذرات با ماده است و به گستردگی در فیزیک ذرات، مطالعات پزشکی و علوم فضا مورد استفاده قرار می‌گیرد [۵]. بسته به رژیم انرژی که در آن شبیه سازی‌ها انجام می‌شود، جینت ٤ چندین مدل را در قالب فهرست فیزیک ارائه می‌دهد که شامل فرآیندهای فیزیکی مورد نیاز است. در این شبیه سازی فرآیندهای تبدیل گاما، پراکندگی چندگانه، تابش ترمزی، یونیزاسیون، پراکندگی کامپتون و فوتوالکتریک در نظر گرفته شده‌اند.

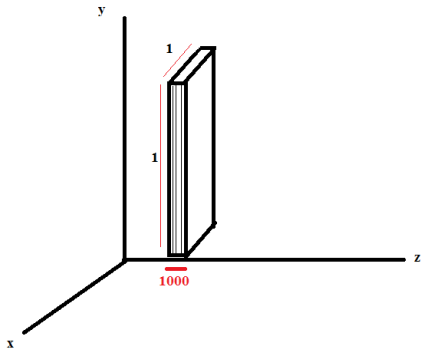
همچنین ماده مورد استفاده در این شبیه‌سازی تنگستن انتخاب شده است. تنگستن فلزی با ویژگی‌های منحصر بفرد از جمله نقطه

[1] . Runaway Electrons
[2] GEANT
[3] . CERN

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

ذوب بالا، مقاومت بالا در برابر اســپاترینگ و صــدمات نوترونی، میزان فعال‌سازی پایین در برابر تابش نوترونی، فشار بخار پایین در د مای ذوب، خوردگی ا ندک و ویژگی های ترمودینامیکی خوب اســت و به همین دلیل در بین نامزدهای موجود، یک گزینه اصــلی برای ا ستفاده در دیواره اول راکتورهای همجو شی مانند ایتر و دمو می‌باشد. بنابراین در این شبیه‌سازی نیز به عنوان ماده هدف انتخاب شده است [٦].

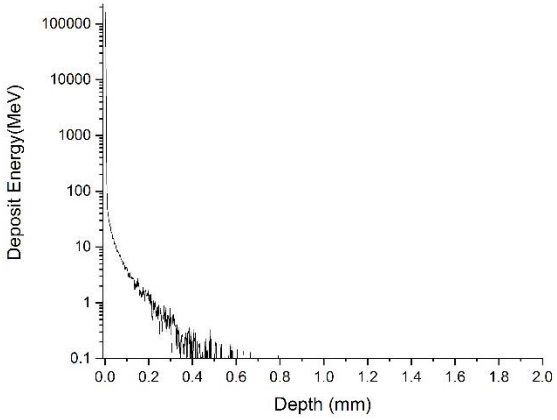
هدف تنگستن با طول و عرض ٤ سانتی‌متر و ضخامت ۲ میلی‌متر انتخاب شده است که در مش‌بندی (شکل ۱)، هدف در راستای x به یک قسمت، در راستای y به یک قسمت و در راستای z یا ضخامت به ۱۰۰۰ قسمت تقسیم شده است. به عبارت دیگر مش‌ها لایه هایی عمود بر محور Z با طول و عرض ٤ سانتی‌متر و ضخامت ۲ میکرون انتخاب شده‌اند که میزان رسوب انرژی در هر یک از این لایه‌ها و در نهایت میزان رسوب انرژی کل روی هدف، تحت تابش باریکه الکترون‌های گریزان برآورد خواهد گردید. فضای قرارگیری هدف خلاء فرض شده است. همانطور که ذکر شد چشمه از نوع باریکه الکترونی با شعاع ۳ میلیمتر در امتداد محور z است که به صورت عمود بر صفحه هدف می‌تابد. در این کار تحقیقاتی، شبیه-سازی عمق نفوذ و میزان رسوب انرژی برای انرژی‌های ۱۰۰ KeV، ۰/۵ MeV، ۱ MeV و ۳ MeV انجام گرفته است.



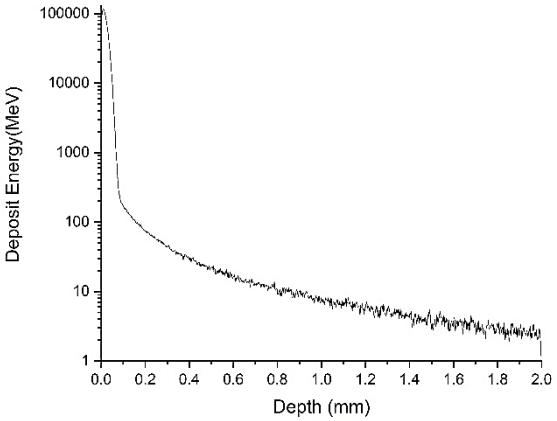
شکل ۱ : نحوه مش بندی صفحه هدف تنگستن.

بحث و نتیجه گیری

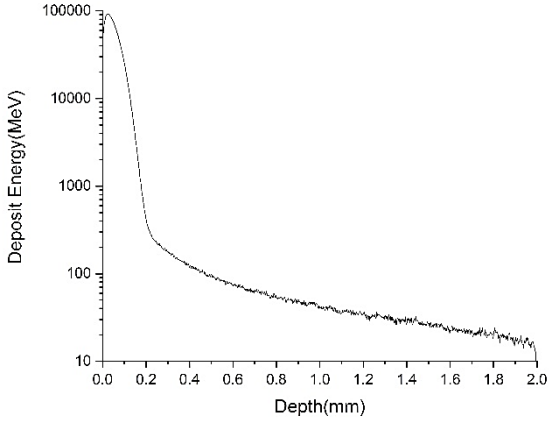
پس از انجام شبیه‌سازی و دریافت خروجی‌ها، نمودارهای انرژی رسوب‌یافته بر حسب عمق نفوذ تولید شد که این نمودارها برای انرژی‌های مذکور به صورت زیر می‌باشند.



شکل۲ : نمودار رسوب انرژی الکترون های تابشی در عمق ماده هدف برای انرژی باریکه ۱۰۰ KeV.

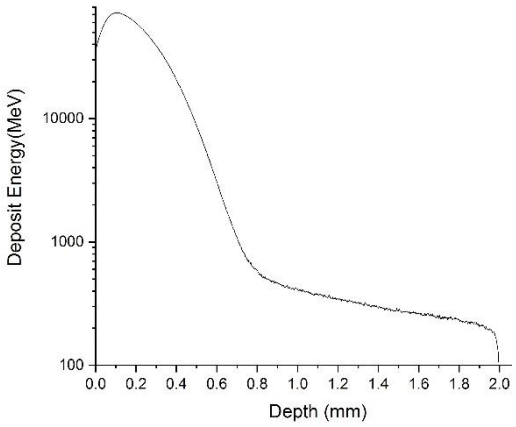


شکل۳ : نمودار رسوب انرژی الکترون های تابشی در عمق ماده هدف برای انرژی باریکه ۰/۵ MeV .



شکل٤ : نمودار رسوب انرژی الکترون های تابشی در عمق ماده هدف برای انرژی باریکه ۱ MeV.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل۵ : نمودار رسوب انرژی ذرات تابشی در عمق ماده هدف برای انرژی باریکه ۳ MeV.

همانطور که در شکل ۲ تا ۵ مشاهده می‌گردد، با افزایش انرژی باریکه ذرات الکترون، میزان رسوب انرژی و میزان عمق نفوذ آن در هدف تنگستن افزایش یافته است.

همانطور که در شکل ۲ دیده می‌شود، برای انرژی ۱۰۰ KeV، ذرات تنها تا نیمه ابتدایی هدف نفوذ کرده و عمده رسوب انرژی در چند لایه ابتدایی هدف است. اما بیشینه رسوب انرژی با توجه به مش-بندی در لایه اول (۲ میکرون ابتدیی هدف) است. با توجه به شکل ۳، با افزایش انرژی به مقدار ۰/۵ MeV، مقدار انرژی رسوب یافته در هدف افزایش پیدا کرده اما همانطور که مشاهده می‌شود بیشینه رسوب انرژی از لایه ابتدایی در شکل ۲، به لایه پنجم منتقل شده است طوریکه حدوداً در ۱۰ میکرون ابتدایی بیشترین جذب و رسوب انرژی حاصل گردیده است. یعنی رسوب انرژی از اولین لایه تا پنجمین لایه به مقدار بیشینه خود رسیده و از آن پس کاهش یافته و نهایتاً در عمق ۰/۱ mm قابل توجه است. در شکل ٤ با افزایش انرژی به مقدار ۱ MeV، پیک رسوب انرژی باز هم به لایه‌های داخلی‌تر منتقل شده است و عمده رسوب انرژی تا عمق ۰/۲mm ادامه می‌یابد همچنین سطح زیر نمودار رسوب انرژی در عمق هدف نیز افزایش یافته که نشان می‌دهد مقدار کلی رسوب انرژی در هدف افزایش یافته است. در شکل ۵ با افزایش مقدار انرژی الکترون‌ها تا ۳ MeV، پیک رسوب انرژی تا عمق تقریباً ۰/۱mm به داخل منتقل شده و عمده رسوب انرژی در عمق ۰/۸ mm است که نشان دهنده نفوذ ذرات در لایه‌های داخلی‌تر نسبت به سطح خارجی هدف است.

نتیجه گیری

همانطور که از شکل‌های ۲-۵ مشاهده گردید، با افزایش انرژی ذرات الکترون چشمه، میزان عمق نفوذ ذرات در هدف افزایش یافته و همچنین بیشینه رسوب انرژی به لایه‌های داخلی‌تر هدف منتقل گردید که در صورتی‌که این هدف دیواره توکامک و یا لیمیتر باشد، میزان آسیب وارده ناشی از رسوب انرژی الکترون‌های گریزان با افزایش انرژی آنها، به مراتب بیشتر خواهد بود زیرا رسوب انرژی سبب ایجاد نقص‌هایی در ماده هدف می‌گردد که عمده‌ترین آن ایجاد ذوب‌شدگی و خوردگی است. همچنین با افزایش انرژی ذرات تابشی، سطح زیر نمودار رسوب انرژی بر حسب عمق ماده هدف افزایش یافته که نشان‌دهنده میزان افزایش کل انرژی رسوب‌یافته در ماده هدف است. جدول ۱، مقدار بهنجار شده انرژی رسوب یافته کل به ازای هر باریکه در هدف تنگستن، برای انرژی‌هایی که شبیه-سازی برای آنها صورت گرفته را نشان می‌دهد.

جدول۱ : رسوب انرژی کل برای چشمه با انرژی‌های مورد نظر.

حالت های انجام شده در شبیه سازی	ذره با انرژی ۱۰۰KeV	ذره با انرژی ۰،۵ MeV	ذره با انرژی ۱ MeV	ذره با انرژی ۳ MeV
انرژی رسوب یافته کل	Kev ٦٥/١٨٢٨	Kev ٣٥٦/١٨٦	Kev ٧٢٧//٩٧٣	Mev ٢/٣١٩٢

همانطور که از جدول ۱ مشاهده می‌شود، با افزایش انرژی میزان رسوب انرژی کل در ماده هدف، افزایش یافته است بنابراین میزان آسیب وارده نیز بیشتر خواهد بود.

مرجع‌ها

[1]. H.-W. Bartels; " Impact of runaway electrons "; *Fusion Engineering and Design* **23**, (1993) 323-328.

[2]. H. Bolt, et al., Analysis of interaction of disruption induced Runaway Electrons with Plasma Facing Components components in next generation tokamaks, *J. Nucl. Sci. Technol.* **28**, No. 9 (1991) 806-813.

[3]. Ansh Patel , Santosh P. Pandya, " Simulation of runaway electron generation in fusion grade tokamak and suppression by impurity injection", *PSSI-PLASMA SCHOLARS COLLOQUIUM*, (2021).

[4]. G. Maddaluno, G. Maruccia, et al, "Energy deposition and thermal effects of runaway electrons in ITER-FEAT plasma facing components", *Journal of Nuclear Materials* **313–316** (2003) 651–656.

[5]. A. Skeltved, N.i Østgaard. "Modeling the relativistic runaway electron avalanche and the feedback mechanism with GEANT4", *Journal of Geophysical Research: Space Physics*, (2014) .

[6]. S.H. Saw, V. Damideh, et al, "Damage Study of Irradiated Tungsten using fast focus mode of a 2.2 kJ plasma focus", *Elsevier Vacuum* **144** (2017) 14e20.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تاثیر لزجی و عددمویینگی بر روی دینامیک حرکت قطره‌ها در میکروکانال انبساط ناگهانی

حیدری زرنه ، زینب[۱] ؛ کدیور، عرفان[۲]

[۱،۲]دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شیراز، بلوار مدرس ، شیراز

چکیده

دینامیک الحاق دو قطره در حال جریان در ریزسیال انبساط ناگهانی به طور عددی مورد مطالعه قرار گرفته‌شده است. در این مطالعه، معادله انتگرالی بدست آمده از معادله دیفرانسیل برینکمن، با استفاده از روش المان مرزی حل شده است. اثر فاصله سطحی قطرات، لزجت و عدد مویینگی، وسرعت قطرات بر دینامیک الحاق بررسی شده است .

کلید واژه ها :ریزسیال، انبساط ناگهانی، الحاق قطرات، معادله برینکمن، روش المان مرزی

Effect of viscosity and capillary number on the dynamics of droplets motion in the sudden expansion microchannel

Heidary Zarneh, Zeinab[1]; Kadivar, Erfan[2]

[1,2]Department of Physics, Shiraz University of Technology, Shiraz

Abstract

The coalescence dynamics of two droplets flowing through the sudden expansion microchannel has been numerically studied. In this work, the integral equation of the Brinkman's differential equation has been numerically solved by applying the boundary element method. The effect of the droplet-droplet distance, viscosity and capillary number on the coalescence dynamics have been studied

Keywords: *Sudden expansion microchannel, Droplet coalescence, Brinkman equation, Boundary element method*

PACS No. *47*

مقدمه

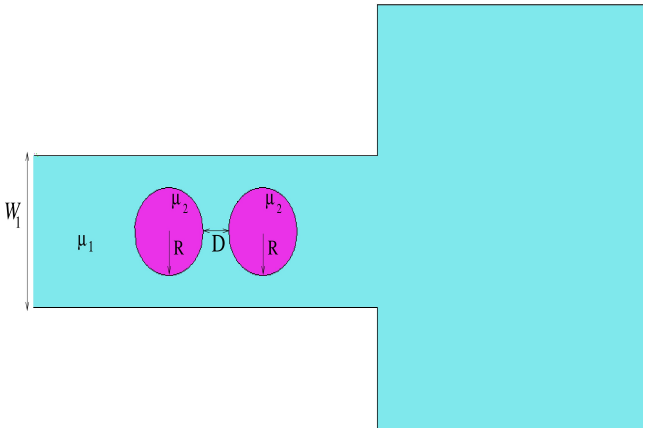
ریزسیال‌ها قابلیت تولید قطرات معلق، کنترل و مرتب‌سازی آن‌ها را دارند[۳-۱]. یکی از کاربردهای مهم در تکنولوژی ریزسیال‌ها، الحاق قطرات است که موضوعی بسیار ضروری در گسترش حوزه رئولوژیکی و سیستم‌های ارسال دارو می‌باشد[۴]. الحاق قطرات در کانال‌های ریزسیال در سال‌های اخیر به صورت تجربی و عددی مطالعه شده است. واسان و همکارانش اولین محققانی بودند که کاربرد الحاق قطرات را در افزایش بهره بازیابی نفت مطالعه نمودند[۵]. هنگامی که دو یا چند قطره به یکدیگر نزدیک می‌شوند، لایه مایع بین قطرات با فشردن در مرز نازک‌تر می‌شود. آهنگ نازک شدن فیلم مایع به فشار موییینگی و فشار جدایی آن‌ها بستگی دارد[۶]. ضخامت لایه مایع با نسبت کشش سطحی و نیروی وشکسانی تخمین زده می‌شود[۷]. الحاق قطرات توسط جریان با واسطه هندسی در ریزسیال توسط تان و همکارانش به صورت تجربی مورد مطالعه قرار گرفته است[۸]. آن‌ها سه نوع رژیم مختلف همجوشی قطره ای را یافته‌اند. ریچرت و واکر به طور تجربی دینامیک الحاق روغن پوشش داده شده در لایه‌های ماده فعال چربی غیرقابل جذب را مطالعه کرده‌اند. نتایج آن‌ها دو نوع رفتار الحاق شامل الحاق سریع در پوشش سطح پایین و الحاق آهسته در پوشش سطح بالا را پیشنهاد می کند[۹]. اثر اندازه

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

قطرات و غلظت ماده فعال سطحی چربی به طور تجربی توسط پولیتوا و همکارانش مورد مطالعه قرارگرفته است[۱۰]. آن‌ها رابطه بین غلظت ماده فعال سطحی چربی و طول عمر قطرات را بررسی کرده‌اند. در این مطالعه الحاق قطرات در ریزسیال انبساط ناگهانی و کمیت‌های موثرمانند نسبت لزجت دوفاز،سرعت قطره وعددمویینگی بر الحاق را بررسی می‌کنیم.

مدل فیزیکی

در این مطالعه الحاق دو قطره با مساحت‌های یکسان در یک ریزسیال دارای انبساط ناگهانی مورد بررسی قرار می‌گیرد. هندسه مورد نظر در شکل۱ نشان داده شده‌است.



شکل۱:هندسه مورد مطالعه از دو کانال مستطیلی باریک و پهن تشکیل شده است. شعاع قطرات R و فاصله سطح-سطح آنها D با وشکسانی μ_1 در سیال زمینه با وشکسانی μ_2 جریان دارند.

پهنای کانال ورودی و خروجی به ترتیب W_1 و W_2 می‌باشد که در راستای محور Y است. نسبت پهنای خروجی به پهنای ورودی با $W=\frac{W_2}{W_1}$ تعریف می‌شود. جریان دوفازی از دو فاز پیوسته با برچسب ۱ و فاز قطره با برچسب ۲ تشکیل شده است. وشکسانی سیال زمینه و قطره‌ها با μ_1 و μ_2 نشان می‌دهیم. فازهای قطره و سیال زمینه از ورودی W_1 به داخل ریزسیال تزریق می‌شوند و سرانجام از خروجی W_2 خارج می‌شوند. فاصله سطح تا سطح بین قطره‌ها D و شعاع آنها R در نظر گرفته‌می‌شود. در حالتی که نسبت ارتفاع کانال نسبت به پهنای آن خیلی کوچک‌تر یک باشد، نمایه سرعت حاصل از معادله استوکس سه بعدی با حالت دوبعدی رفتار مشابه دارد. بنابراین می‌توان با روش میانگیری عمق دو بعدی به جای معادله استوکس سه بعدی استفاده کرد. در حد عدد رینولدز پایین جریان فاز قطرات و سیال زمینه با معادله برینکمن توصیف می‌شود که تعمیم یافته معادله دارسی می‌باشد:

$$\vec{\nabla} p^{(i)} = \alpha_i(\vec{\nabla}^2 \vec{V}^{(i)} - k^2\vec{V}^{(i)}) \qquad i \in \{1,2\} \qquad (۱)$$

و معادله پیوستگی زیر را نتیجه می‌دهد:

$$\nabla.V^{(i)} = 0 \qquad i \in \{1,2\} \qquad (۲)$$

P فشار بدون بعد، V سرعت بدون بعد، $\alpha_i = \frac{\mu_i}{\mu_1}$ نسبت وشکسانی فاز قطره به سیال زمینه $k = \sqrt{12}/H$ و H ارتفاع کانال است. در غیاب میدان‌های خارجی و اثر مارانگونی اولین شرط مرزی در سطح قطره، به دلیل انحنای موضعی سطح، ناپیوستگی بردار بهنجار تانسور تنش در فصل مشترک فاز قطره و سیال زمینه است :

$$\Delta \vec{f} = \vec{f}^{(2)} - \vec{f}^{(1)} = \gamma(\frac{\pi}{4}k_{\parallel} + k_{\perp})\hat{n} \qquad (۳)$$

که $\vec{f} = \sigma.\hat{n}$ ، σ تانسور تنش، $\hat{n}$ بردار یکه عمود بر فصل مشترک، γ کشش سطحی و $k_{\parallel}$ و $k_{\perp}$ به ترتیب انحنای موضعی قطره در صفحه شارش و عمود بر صفحه شارش است.

با توجه به اینکه در فصل مشترک قطره و سیال زمینه انتقال جرم نداریم، دومین شرط مرزی، پیوستگی مولفه عمودی سرعت در مرز برطبق معادله پیوستگی(۲) برقرار است:

$$V^{(1)} = V^{(2)} \neq 0 \qquad (٤)$$

با استفاده از قضایای اول و دوم گرین، معادله دیفرانسیلی(۱) به معادله خودسازگار انتگرالی زیر تبدیل می‌گردد.

$$\bar{V}_j^{(1)}(\vec{r}_0) = \frac{1}{c_l}\oint_{\Gamma_{W,\Gamma_O}} [\bar{V}_j^{(1)}(\vec{r})T_{ijk}^B(\vec{r},\vec{r}_0)n_k - \qquad (۵)$$

$$f_i^{(1)}G_{ijk}^B(\vec{r},\vec{r}_0)]dl + \frac{1}{c_l}\oint_{\Gamma_{1,2}} [(1-\frac{\mu_2}{\mu_1}) +$$

$$\bar{V}_i^{(1)}(\vec{r})T_{ijk}^B(\vec{r},\vec{r}_0)n_k - \Delta\vec{f}_i^{(1)}G_{ij}^B(\vec{r},\vec{r}_0)]dl$$

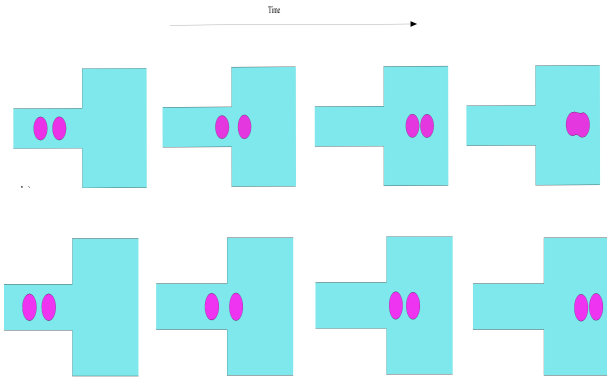
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

G_{ij}^B، P_i^B و T_{ijk}^B به ترتیب توابع گرین برینکمن سرعت، فشار و تنش سطح Γ_W و Γ_O مرز دیواره کانال، مرز ورودی و خروجی می‌باشند $\vec{r}=(x,y)$ و $\vec{r}_0=(x_0,y_0)$ به ترتیب نقاط میدان و تکینگی هستند. برای حل معادله انتگرالی، مرز مشترک دو سیال با استفاده از روش معادله کثیرالجمله درجه سه دوره‌ای شبکه بندی می‌گردد.

نتایج

در این مطالعه الحاق دو قطره با مساحت‌های یکسان و کمیت‌های تاثیر گذار در پدیده الحاق مانند لزجت، عدد مویینگی و فاصله بحرانی را بررسی خواهیم‌کرد.

دو قطره با فاصله اولیه D که از کانال باریک به سمت کانال پهن حرکت می‌کنند را در نظربگیرید.

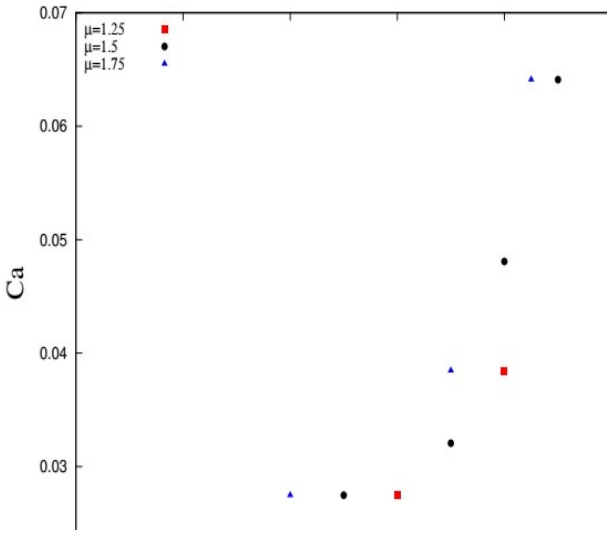


شکل ۲ . تصاویر جریان قطرات در لحظات مختلف ثبت شده‌است.الف)حالت الحاق قطرات بعد از ورود به کانال پهن را نمایش می‌دهد. ب) به علت بزرگتربودن فاصله اولیه از فاصله بحرانی حالت غیرالحاق را نشان می‌دهد.

شکل ۲ تصاویری از جریان قطرات در ریزسیال انبساط ناگهانی در زمان‌های مختلف نشان می‌دهد. موقعی که قطره اول وارد انبساط ریزسیال می‌شود به علت پایستگی شارش حجمی، با افزایش پهنای کانال سرعت قطره کاهش پیدا می‌کند و تحت تنش معمولی در ناحیه انبساط ناگهانی شروع به تغییر شکل می‌کند. وقتی که قطره دوم وارد کانال پهن می‌شود دو حالت متفاوت برای حرکت قطرات به وجود می‌آید، در حالت اول اگر فاصله بین قطرات به حدی کوچک باشد($D<D_c$) که قطره دوم سطح عقبی قطره اول را لمس می‌کند، الحاق قطره‌ها در کانال پهن اتفاق می‌افتد که حالت الحاق نامیده می‌شود. در حالت دوم که حالت غیر الحاق نامیده می‌شود، زمانی رخ می‌دهد که فاصله بین قطرات به حدی بزرگ است($D>D_c$) که قطره‌ها سطح همدیگر را لمس نمی‌کنند.

اثرعددمویینگی

به منظور بررسی اثر لزجت قطرات در پدیده الحاق، عدد مویینگی و مساحت قطرات را ثابت در نظرگرفتیم و فاصله اولیه‌های متفاوتی را بررسی می‌کنیم تا فاصله بحرانی که پدیده الحاق رخ می‌دهد را پیدا کنیم.



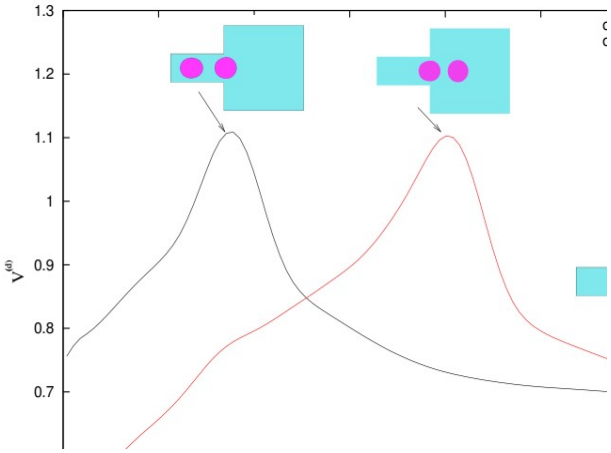
شکل ۳. نمودار دینامیک الحاق به عنوان تابعی از فاصله بحرانی قطره–قطره و عددمویینگی برای سه مقدار مختلف نسبت لزجت

شکل ۳ نمودار دینامیک االحاق را به عنوان تابعی از فاصله بحرانی قطره–قطره و عدد مویینگی برای سه مقدار مختلف نسبت لزجت دو سیال نشان می‌دهد. می‌توان دریافت که با افزایش عددمویینگی، فاصله بحرانی قطرات افزایش می‌یابد. نتایج عددی نشان می‌دهد که در مقدار معین عدد مویینگی، فاصله بحرانی قطره–قطره با کاهش نسبت لزجت فاز قطره به فاز سیال زمینه افزایش می‌یابد.

اثر سرعت قطرات

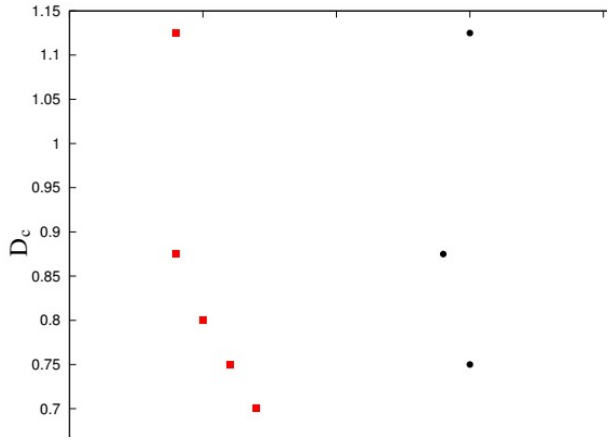
شکل۴ سرعت قطرات را به عنوان تابعی از زمان نشان می‌دهد. به دلیل میدان سرعت فاز پیوسته در ورودی کانال پهن، با ورود قطره به کانال انبساط ناگهانی، سرعت قطره کاهش می‌یابد. بنابراین، قطره دوم به قطره اول نزدیک می‌شود

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل۴. سرعت قطرات به عنوان تابعی از زمان. پارامترهای عددی عبارتند از: $A_d = 0:32$، $Ca = 0:05$ و $W = 3.$.

اثرنسبت لزجت



شکل۵ دینامیک الحاق به عنوان تابعی از فاصله بحرانی قطره–قطره و نسبت لزجت فاز قطره به فاز حامل برای سه مقدار مختلف نسبت پهنا.

تغییر شکل قطره به نسبت لزجت فاز قطره به فاز سیال حامل بستگی دارد. اکنون، ما تأثیر نسبت لزجت را بر دینامیک الحاق قطره–قطره بررسی می‌کنیم. به این ترتیب تمام پارامترها را ثابت نگه داشتیم و نسبت لزجت را تغییر دادیم. برای تغییر مقدار نسبت لزجت بدون تأثیر بر عددمویینگی، لزجت سیال زمینه را ثابت نگه داشتیم و ویسکوزیته قطرات را تغییر دادیم. شکل۵ اثر نسبت لزجت بر فاصله قطره–قطره را نشان می‌دهد. نتایج عددی نشان می‌دهد که با کاهش نسبت لزجت، فاصله بحرانی قطره–قطره افزایش می‌یابد.

نتیجه گیری

ما یک مطالعه عددی از ادغام قطرات دو قطره که از طریق یک میکروسیال انبساط ناگهانی جریان می‌یابند، ارائه کرده‌ایم. ما معادله انتگرال معادله دیفرانسیل برینکمن را با استفاده از روش المان مرزی حل کرده‌ایم و رژیم‌های مختلف که توسط جداسازی نسبی قطرات کنترل می‌شوند شناسایی شده‌اند: قطراتی با اندازه یکسان با فاصله اولیه D وارد کانال انبساط ناگهانی می‌شوند و در کانال پهن با شرط $D<D_c$ الحاق اتفاق می‌افتد. انتقال بین رژیم‌های الحاق و غیرالحاق در نمودارهای فاز مورد بحث قرار گرفت. ما دریافتیم که فاصله جداسازی بحرانی دو قطره به عددمویینگی، نسبت لزجت، و نسبت خروجی به عرض کانال ورودی بستگی دارد. نتایج عددی نشان می‌دهد که با افزایش عددمویینگی و نسبت پهنای کانال، فاصله بحرانی نیز افزایش می‌یابد اما فاصله بحرانی با نسبت لزجت رابطه عکس دارد. نتایج عددی ما مطابقت کمی خوبی با مطالعه تجربی قبلی دارد [۱۱].

مرجع‌ها

[۱] Atencia, Javier, and David J. Beebe. "Controlled microfluidic interfaces." *Nature* **437.7059** (2005): 648-655.

[۲] Joanicot, Mathieu, and Armand Ajdari. "Droplet control for microfluidics." *Science* **309.5736** (2005): 887-888.

[۳] Baroud, Charles N., Francois Gallaire, and Rémi Dangla. "Dynamics of microfluidic droplets." *Lab on a Chip* **10.16** (2010): 2032-2045.

[۴] Vinckier, Inge, Jan Mewis, and Paula Moldenaers. "Stress relaxation as a microstructural probe for immiscible polymer blends." *Rheologica acta* **36.5** (1997): 513-523.

[۵] Wasan, D. T., et al. "Observations on the coalescence behavior of oil droplets and emulsion stability in enhanced oil recovery." *Society of Petroleum Engineers Journal* **18.06** (1978): 409-417.

[۶] Eow, John S., and Mojtaba Ghadiri. "Motion, deformation and break-up of aqueous drops in oils under high electric field strengths." *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* **42.4** (2003): 259-272.

[۷] Thoroddsen, S. T., et al. "On the coalescence speed of bubbles." *Physics of Fluids* **17.7** (2005): 071703.

[۸] Tan, Yung-Chieh, et al. "Design of microfluidic channel geometries for the control of droplet volume, chemical concentration, and sorting." *Lab on a Chip* **4.4** (2004): 292-298.

[۹] Reichert, Matthew D., and Lynn M. Walker. "Coalescence behavior of oil droplets coated in irreversibly-adsorbed surfactant layers." *Journal of Colloid and Interface Science* **449** (2015): 480-487.

[۱۰] Politova, Nadya I., et al. "Coalescence stability of water-in-oil drops: Effects of drop size and surfactant concentration." *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects* **531** (2017): 32-39.

[۱۱] Schirrmann, Kerstin, Gabriel Cáceres-Aravena, and Anne Juel. "Self-assembly of coated microdroplets at the sudden expansion of a microchannel." Microfluidics and Nanofluidics **25.3** (2021): 1-13.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مطالعه دینامیک سلول مخمر به منظور بررسی پدیده بیان ژن

نعمتی ، فاطمه[1] ؛ بهنیا، سهراب[1]

[1]دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی ارومیه ، انتهای خیابان بند ، ارومیه

چکیده

پدیده بیان ژن، از اهمیت ویژه‌ای در بین محققان بیولوژیک و بیوفیزیک برخوردار است. این پدیده که متشکل از دو مرحله رونویسی و ترجمه است در جهت کد کردن اطلاعات ژنتیکی و تولید پروتئین پیش می‌رود. در این مقاله با استفاده از مدل مونک به بررسی پدیده بیان ژن در سلول مخمر پرداخته شد. با استفاده از رهیافت بعد فرکتالی به تحلیل سیستم پرداخته شد. افزایش نرخ تاخیر زمانی منجر به افزایش سطح mRNA شد. حساسیت سیستم به پارامترهای مطرح در پدیده مشخص شد. $\mu_m=0.03$ *در حضور نرخ تخریب پروتئین متغییر و نرخ تاخیر ثابت به عنوان حد آستانه سیستم در نظر گرفته شد، همچنین* $\mu_m=0.059$ *در حضور نرخ تاخیر زمانی متغییر و نرخ تخریب ثابت پروتئین به عنوان آستانه ای برای سیستم به دست آمد.*

واژه های کلیدی: *سلول مخمر، بیان ژن، بعد فرکتالی*

Study yeast cell dynamics in order to investigate the gene expression phenomena

Fatemeh, Nemati[1]; Behnia, Sohrab[1]

[1] *Department of Physics, Urmia University of Technology, Urmia*

Abstract

The phenomenon of gene expression is of particular importance among biological and biophysical researchers. This phenomenon, which consists of two stages of transcription and translation, proceeds to encode genetic information and protein production. In this paper, the phenomenon of gene expression in yeast cells was investigated using the Monk model. The system was analyzed using the fractal dimension approach. Increasing time delay rate led to an increase in mRNA level. The sensitivity of the system to the parameters in this phenomenon was determined. $\mu_m = 0.03$ *was considered as the threshold of the system in the presence of variable protein degradation rate and constant latency rate, also* $\mu_m = 0.059$ *was obtained as the threshold for the system in the presence of variable time lag rate and constant protein degradation rate.*

***Keywords**: Yeast cell, Gene expression, Fractal dimension*

PACS No

مقدمه

در اوایل دهه 1920، ژنتیک‌دانان پیش‌بینی کردند که ژن‌ها می‌توانند «نقش اساسی در تعیین ماهیت همه مواد سلولی، ساختارهای سلولی و فعالیت‌های سلولی داشته باشند» [1]. اکنون مشخص شده است که اطلاعات ژنتیکی از طریق بازتولید (رونویسی[1]) بخشی از DNA (یک ژن) برای تولید مولکول های RNA پیام رسان (mRNA) به سیستم بیولوژیکی منتقل می شود. سپس مولکول های mRNA به عنوان الگوهایی برای سنتز یک

[1] Transcription

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

پروتئین یا تعداد کمی از پروتئین‌ها استفاده می شود(ترجمه[1]). این فرآیند انتقال اطلاعات به عنوان بیان ژن[2] شناخته می‌شود [2] و در تمام اشکال زندگی شناخته شده برای کنترل ساختار، عملکردها، فرآیندهای تصمیم گیری، سازگاری و فنوتیپ[3]های سلول رخ می دهد. بنابراین درک بیان ژن و تنظیم آن موضوعی اساسی است. مدل‌سازی ریاضی و شبیه‌سازی رایانه‌ای می‌تواند درک دینامیک فرآیندهای بیولوژیکی کمک کند و همچنین بستری را برای انواع تحلیل‌های محاسباتی فراهم کند. روش‌های محاسباتی زیادی در مدل سازی شبکه های ژنی استفاده می‌شود.

با توجه به اینکه، مدل مونک تاخیر زمانی رونویسی را تحت یک رابطه غیرخطی در نظر می‌گرفت، جالب توجه بود و در این مقاله مبنای مطالعه پدیده بیان ژن بر روی مخمر ساکارومایسیس سرویزیه[4] به عنوان ساختاری که هم کاربرد در پزشکی، هم صنعت دارویی و غذایی و زندگی روزمره، قرار گرفت. با توجه به طبیعت غیرخطی پدیده بیان ژن، از طریق رهیافت بعد فرکتالی، پایداری پدیده مورد بررسی قرار می‌گیرد.

مدل و روش

در این مقاله، با انتخاب مدل دوباره مقیاس بندی شده مونک که به صورت زیر بیان می‌شود به بررسی پدیده بیان ژن پرداخته خواهد شد [3]:

$$\dot{m}(t)=\frac{1}{1+\left(p(t-\tau)/p_0\right)^n}-\mu_m m(t) \quad (1)$$

$$\dot{p}(t)=m(t)-\mu_p p(t) \quad (2)$$

که به ترتیب در جدول 1 معرفی می‌شوند. با توجه به اینکه آزمایش تجربی بسیاری از فرآیندهای بیولوژیکی به دلیل محدودیت‌های اخلاقی و پرهزینه بودن، امکان پذیر نیست، لذا یافتن مدل‌های ریاضی با تطابق مناسب با نتایج تجربی که شبیه‌سازی فرآیندهای بیولوژیک در محیط کامپیوتری و امکان پیش‌بینی آینده سیستم را امکان پذیر کند از ملزومات حال حاضر هست.

جدول 1: پارامترهای مدل مونک

نماد	توضیح	مدل مونک[3]
τ	تاخیر زمانی در رونویسی	18.5 دقیقه
μ_m	نرخ تخریب mRNA	0.03
μ_p	نرخ تخریب پروتئین	0.03
P_0	غلظت آستانه	[100-10]
n	ضریب Hill	[10-2]

ژن، به عنوان بخشی از DNA، ساختار مولتی فرکتالی دارد. ساختار فرکتالی به ساختارهایی گفته می‌شود که به اصلاح کسری هستند و ویژگی خودمتشابهی دارند. اصطلاح مولتی فراکتال توسط فریش[5] و پاریسی[6] در سال 1983 ابداع شد، و مندلبروت، آن را تأیید کرد. $f(\alpha)$ به عنوان ابزاری که بعد فرکتالی مجموعه‌ای از نقاط را تعیین می‌کند، شناخته می‌شود [4]. $f(\alpha)$ در واقع تابعی محدب از α است، که راس منحنی با بعد توپولوژیک برابر است. جالب توجه است که تغییر پارامتر کنترل، دامنه طیف تکینگی $f(\alpha)$ را تغییر می‌دهد، بنابراین پاسخ سیستم دینامیکی را می‌توان نسبت به تغییر پارامتر کنترل تعیین نمود.

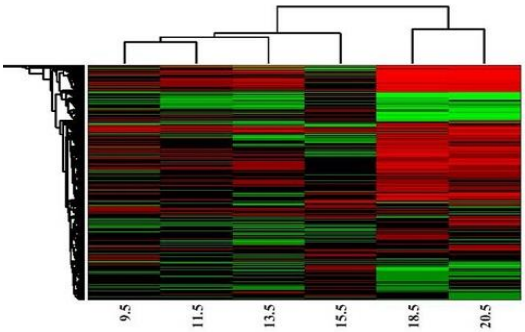
بحث و نتیجه‌گیری

اطلاعات تجربی بیان ژن مربوط به سلول مخمر، از بانک اطلاعات ژن استخراج شد. سلول مخمر دارای 6275 ژن می‌باشد، که تحت شرایط محیطی امکان بیان برخی از آن‌ها به صورت غالب مورد توجه قرار می‌گیرد [5]. یک روش متداول برای تجسم داده های بیان ژن، نمایش آن به عنوان یک نقشه حرارتی[7] است. نقشه حرارتی همچنین ممکن است با روش‌های خوشه‌بندی ترکیب شود که ژن‌ها و یا نمونه‌ها را بر اساس شباهت الگوی بیان ژن‌ها با هم گروه‌بندی می‌کنند. لذا نقشه حرارتی برای ژن‌های نهفته در سلول مخمر مطابق شکل 1 رسم شد. ژن‌ها در سطر و زمان در ستون ها مشخص شده است، ژن‌هایی که فعال نباشند یا به صورت دائمی در طول آزمایش فعال باشند، در نمودار دچار تغییر رنگ نمی-

1 Translation
2 Gene expression
3 Phenotype
4 Saccharomyces cerevisiae
5 Frisch
6 Parisi
7 Heat map

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

شوند. ژن‌هایی که بیان آن‌ها در طول آزمایش تغییر بکند، جالب توجه هستند.

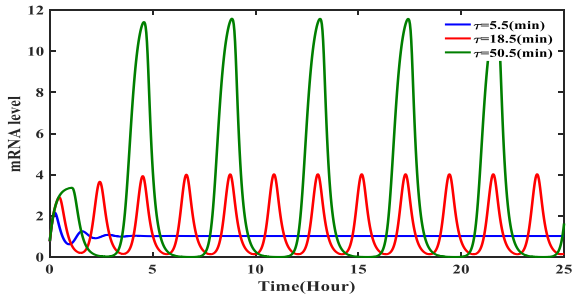


شکل 1: نقشه حرارتی سلول مخمر، محور عمودی معرف ژن‌های نهفته در سلول مخمر و محور افقی زمان آزمایش است.

لذا با استفاده از این ابزار می‌توان ژن‌های غالب را شناسایی کرد. به عبارتی با تغییر شرایط محیطی امکان بیان ژن خاصی را مطالعه کرد. ولی با توجه به اینکه ترتیب دادن همچین آزمایش‌هایی مستلزم هزینه و تجهیزات پیشرفته‌ای هست، لزوم مدل‌سازی‌های ریاضی به منظور شبیه‌سازی فرآیند بیان ژن احساس می‌شود تا با هزینه کمتر، امکان پیش‌بینی پدیده بیان ژن در شرایط محیطی مختلف فراهم شود.

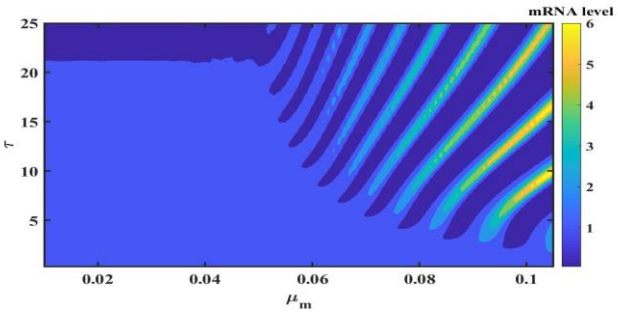
با رسم تغییرات زمانی غلظت مخمر، mRNA برای تاخیر زمانی متفاوت، همانطور که در شکل 2 نشان داده شده است، با افزایش نرخ تاخیر رونویسی، میزان رونویسی mRNA افزایش می‌یابد که در مطالعات سانگ[1] و همکارانش مورد تایید شده می‌باشد [6].

با توجه به اینکه سیستم دینامیکی غیرخطی را نمی‌توان در قالب اجزا به صورت جداگانه بررسی کرد، تغییرات سطح mRNA و پروتئین به صورت همزمان نسبت به تغییر نرخ تخریب mRNA و نرخ تاخیر رونویسی رسم شد. همانطور که در شکل 3 مشاهده می‌شود، جزیره‌هایی با رنگ‌های متفاوت در رنج آبی تیره(حداقل مقدار)تا رنگ زردروشن(حداکثر مقدار) را شامل می‌شود. در نتیجه، می توان گفت که در $\mu_m \leq 0.059$، شاهد حداقل سطح mRNA هستیم ولی با افزایش نرخ تخریب mRNA، به بالاتر از 0.06، سطح mRNA بین مقدار حداقل و حداکثر نوسان می‌کند.



شکل 2: سری زمانی تغییرات غلظت mRNA در حضور نرخ ثابت تخریب پروتئین(μ_p=0.03)، نرخ ثابت تخریب mRNA(μ_m=0.08)، n=5، p_0=21

درشکل 4 نشان داده شده است که در بازه $\mu_m = (0.01 - 0.059)$، با تغییر نرخ رونویسی از 6 تا 25 دقیقه، سطح پروتئین در حداقل مقدار قرار دارد ولی با افزایش نرخ تخریب mRNA به 0.06، تغییر در سطح پروتئین شروع می‌شود و رفتار متناوبی از سیستم با افزایش پارامتر تخریب mRNA مشاهده می‌شود.



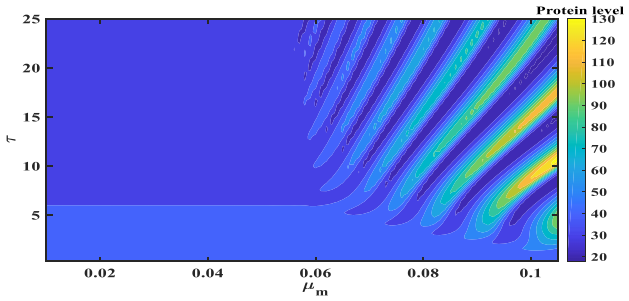
شکل 3: تغییرات همزمان غلظت mRNA نسبت به نرخ تخریب mRNA و نرخ تاخیر رونویسی در حضور، μ_p=0.03، n=5، p_0=21

به منظور مطالعه پایداری نقاط ثابت[2] ، در شکل 5، به رسم تصویر فضای فاز به ازای نرخ تاخیر رونویسی اقدام شد. همانطور که در تصویر مشاهده می‌شود، هنگامی که نرخ تاخیر رونویسی مقدار کوچکتری دارد(دقیقه τ=5.5)، سطح بیان mRNA روندی میرا را طی می‌کند و فضای فاز مربوط به آن مارپیچ می‌باشد و بسته نمی‌شود ولی با افزایش نرخ تاخیر رونویسی تا 18.5 دقیقه، شاهد شکل‌گیری حلقه بسته هستیم، که پایدار هستند، زیرا مسیرهای نزدیک، نه به نقطه ثابت جذب می شوند و نه دفع می‌شوند. با افزایش بیشتر نرخ رونویسی، سیستم پایداری خود را از دست می‌دهد.

[1] Song

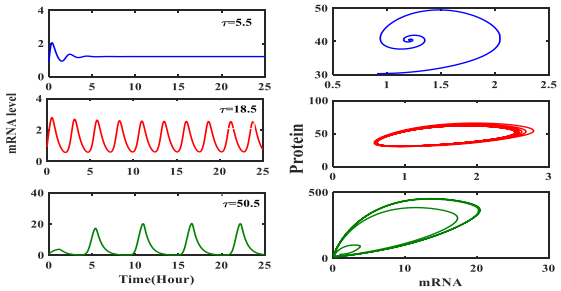
[2] Fixed point

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



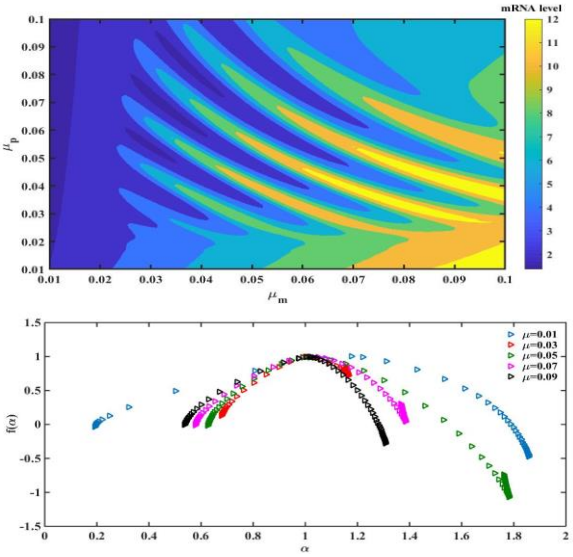
شکل 4: تغییرات همزمان غلظت پروتئین نسبت به نرخ تخریب mRNA و نرخ تاخیر رونویسی در حضور، μ_p=0.03 ،n=5 ،p_0=21

متیوس و همکارانش[1] با بررسی دینامیک غیرخطی در سیستم های بیولوژیک نشان دادند که سیستم بیولوژیک با تغییر پارامترهای کلیدی، می‌تواند پایداری خود را از دست بدهد [7].



شکل 5: فضای فاز به ازای تغییر نرخ تاخیر رونویسی در حضور μ_p=0.03، p_0=21 ،n=5 ،μ_m=0.08

به منظور تحلیل پایداری سیستم از طریق دینامیک غیرخطی، تحلیل بعد طیفی مورد توجه قرار گرفت. با در نظر گرفتن نرخ تخریب mRNA به عنوان پارامتر کنترل، محدوده‌های حساسیت سیستم مشخص می‌شود. با توجه به شکل 6(الف و ب) ، تابع $f(\alpha)$ به ازای μ_m=0.01 که بیانگر حداقل مقدار سطح mRNA بود، در تحلیل ابعادی دارای حداکثر $\Delta\alpha$ می‌باشد و در مقابل μ_m=0.03، دارای $\Delta\alpha$ می‌باشد. به عبارتی تابع $f(\alpha)$ به ازای 0.05،0.07،0.09 μ_m=، دارای $\Delta\alpha$ مابین دو مقدار حداقلی و حداکثری می‌باشد. در نتیجه حساسیت سیستم به شرایط مساله نشان داده شد.



شکل 6 :الف) تغییر همزمان سطح mRNA نسبت به نرخ تخریب mRNA و نرخ تخریب پروتئین. ب)تحلیل طیفی به ازای مقادیر متفاوتی از نرخ تخریب mRNA در حضور μ_p=0.03 ،n=5 ،p_0=21

جمع‌بندی

در این مقاله، به منظور بررسی پدیده بیان ژن، سلول مخمر انتخاب شد. با در نظر گرفتن مدل مونک، به بحث پیرامون مدل ریاضی حاکم بر مساله پرداخته شد. با توجه به طبیعت غیرخطی بیان ژن، از رهیافت بعد فرکتالی برای تحلیل پایداری آن استفاده شد.

مرجع‌ها

[1] H. J. Muller; "Variation due to change in the individual gene"; *The American Naturalist*, **56**, No. 642 (1922) 32-50.
[2] A. Brazma, and J. Vilo; "Gene expression data analysis"; *FEBS letters*, **480**, No. 1 (2000) 17-24.
[3] N. A. Monk; "Oscillatory expression of Hes1, p53, and NF-κB driven by transcriptional time delays"; *Current biology*, **13**, No. 16 (2003) 1409-1413.
[4] Y. U. Shimizu, S. Thurner and K. Ehrenberger; "Multifractal spectra as a measure of complexity in human posture"; *Fractals* **10**, No. 01 (2002) 103-116.
[5] http://www.ncbi.nlm.nih.gov/geo/query/acc.cgi?acc=GSE28
[6] Y. Song, Y. Han and T. Zhang; "Stability and Hopf bifurcation in a model of gene expression with distributed time delays"; *Applied Mathematics and Computation*, **243** (2014) 398-412.
[7] X. P. Wu and M. Eshete; "Bifurcation analysis for a model of gene expression with delays"; *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, **16**, No. 2 (2011) 1073-1088.

[1] Metthewos

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

دینامیک حرکت قطره در کانال همگرا ریز سیال.

حیدری زرنه ، زینب[۱] ؛ کدیور، عرفان[۲]

[۱،۲]دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شیراز، بلوار مدرس ، شیراز

چکیده

در این مطالعه، ما تغییر شکل قطره‌ای را که از طریق عناصر کانالی همگرا و واگرای مسطح که توسط یک میکروکانال باریک به هم متصل شده‌اند، به‌صورت عددی بررسی کردیم. ما توجه خود را بر نسبت تصویر بالای عرض کانال به ارتفاع کانال متمرکز می‌کنیم. بنابراین، فرض کردن جریان دوبعدی فاز قطره‌ای و پیوسته مناسب است که می‌تواند توسط یک مدل برینکمن با میانگین عمق اداره شود. تغییر شکل قطرات به صورت عددی به عنوان تابعی از اندازه قطرات،عددمویینگی و زاویه واگرا محاسبه می‌شود .

واژه های کلیدی: *معادله برینکمن، روش المان مرزی، تغییرشکل قطرات، میکروکانال.، همگرا*

dynamics of droplet motion in the converging microchannel

Heidary Zarneh, Zeinab[1]; Kadivar, Erfan[2]

[1,2]Department of Physics, Shiraz University of Technology, Shiraz

Abstract

In this work, we numerically studied the deformation of a droplet flowing through planar converging channel elements connected by a narrow microchannel. We focus our attention on high aspect ratio of channel width to channel height. Therefore, it is suitable to assume a two-dimensional flow of the droplet and continuous phase which can be governed by a depth-averaged Brinkman model. The droplet deformation is numerically calculated as function of droplet size, capillary number, and diverging angle.

***Keywords**: Brinkman equation, Boundary element method, droplet deformation, microchannel, converging*

PACS No. 47

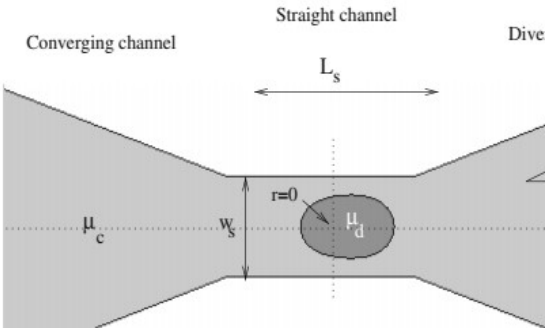
مقدمه

ریزسیالات علم و فناوری سیستم‌هایی است که با حجم بسیار کمی از سیالات در محدوده میکرولیتر تا پیکولیتر درارتباط است. دستگاه‌های ریزسیال به طور گسترده در طیف وسیعی از کاربردهای مهندسی مانند ریز راکتورها و ریزموتورهای به خوبی کنترل شده، ساخت ریزذرات و دستگاه‌های آزمایشگاهی روی تراشه استفاده می‌شوند [۱]. زوگرافوس و همکاران بهینه‌سازی هندسه‌های همگرا میکروکانال تحت شرایط جریان خزشی رابه منظور تولید نرخ کرنش ثابت در امتداد خط مرکزی جریان بررسی کردند. نتایج آنها نشان می‌دهد که در حد دوبعدی زمانی که ناحیه انقباض به اندازه کافی طولانی است، طرح کلی هندسه‌های بهینه‌سازی شده برای ایجاد ناحیه‌ای با نرخ کرنش ثابت به شکل هذلولی ایده‌آل نزدیک می‌شود [۲]. لتیری و همکاران [۳] روش جدیدی برای جابجایی و به دام انداختن مهره ها روی تراشه تنها با استفاده از جریان سیال در یک میکروکانال همگرا مسطح ارائه کردند. ژوان و لی [۴] به طور تجربی حرکات ذرات را در جریان‌های فشار محور کم رینولدز از طریق میکروکانال های همگرا مطالعه کرده‌اند. اثر برش و ازدیاد طول بر تغییر شکل قطره در داخل یک میکروکانال همگرا به صورت عددی و تجربی توسط

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

خیات و همکاران مورد بررسی قرار گرفته است [۵]. آنها از یک فرمول دو بعدی در محدوده روش المان مرزی برای مطالعه یک قطره در حال حرکت در داخل کانال استفاده کرده‌اند. کونا و همکاران [۶] حرکت قطره را از طریق یک کانال همگرا با استفاده از روش المان مرزی مورد مطالعه عددی قرار دادند.

جریان دوفازی قطره معلق درسیال زمینه از طریق یک میکروکانال همگرا در این کار ارائه شده است که مورد مطالعه عددی قرار گرفته است. هندسه در نظر گرفته شده در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل۱ .میکروکانال همگرای مستقیم که ورودی وخروجی کانال در راستایx است.

سیال از طریق یک کانال همگرا، مستقیم و در نهایت واگرا جریان می‌یابد. میکروکانال همگرا زاویه θ را نسبت به کانال مستقیم ایجاد می‌کند. کانال های ورودی و خروجی در امتداد محور x قرار دارند. عرض و طول کانال مستقیم به ترتیب با W_s و L_s نشان داده می‌شود. ما جریانی را که از یک قطره دوبعدی عبور می‌کند، در نظر می‌گیریم که شامل فاز قطره‌ای با برچسب d، و معلق در فازسیال زمینه با برچسب c است. لزجت فازسیال زمینه μ_c و لزجت فاز قطره μ_d است. در حالتی که نسبت ارتفاع کانال نسبت به پهنای آن خیلی کوچک‌تر از یک باشد، مقاومت جریان در میکروکانال زیاد است و نرخ جریان معمولاً در محدوده nl/min تا µl/min و سرعت جریان از مرتبه mm/s است. با توجه به عدد رینولدز بسیار کوچک در این وضعیت جریان، شرایط اینرسی غیرخطی ناچیز است. مشاهدات تجربی نشان می‌دهد که در محدودیت هل-شاو، مشخصات سرعت در جهت عرض کانال تقریباً ثابت است. انحراف از رفتار ثابت، نزدیک به دیواره کانال مشاهده شده است. اگرچه در جهت ارتفاع کانال، محور z شکل سهمی دارد. بنابراین، به جای حل معادله سه بعدی استوکس، یک مسئله میانگین عمق را حل می‌کنیم که به آن مسئله دو بعدی می‌گویند. توجه به این نکته مهم است مدل میانگین کاملاً با استوکس سه بعدی مطابقت دارد بنابراین، این جریان را می توان به خوبی با مدل برینکمن تقریب زد:

$$\vec{\nabla} p^{(i)} = \alpha_i(\vec{\nabla}^2 \vec{V}^{(i)} - k^2\vec{V}^{(i)}) \qquad i \in \{1,2\} \qquad (۱)$$

و معادله پیوستگی زیر را نتیجه می‌دهد:

$$\nabla.V^{(i)} = 0 \qquad i \in \{1,2\} \qquad (۲)$$

P فشار بدون بعد، V سرعت بدون بعد، $\alpha_i = \frac{\mu_i}{\mu_1}$ نسبت وشکسانی فاز قطره به سیال زمینه $k = \sqrt{12}/H$ و H ارتفاع کانال است. در غیاب میدان‌های خارجی و اثر مارانگونی اولین شرط مرزی در سطح قطره، به دلیل انحنای موضعی سطح، ناپیوستگی بردار بهنجار تانسور تنش در فصل مشترک فاز قطره و سیال زمینه است :

$$\Delta \vec{f} = \vec{f}^{(2)} - \vec{f}^{(1)} = \gamma(\frac{\pi}{4}k_{\parallel} + k_{\perp})\hat{n} \qquad (۳)$$

که $\vec{f} = \sigma.\hat{n}$ ، σ تانسور تنش، $\hat{n}$ بردار یکه عمود بر فصل مشترک، γ کشش سطحی و $k_{\parallel}$ و $k_{\perp}$ به ترتیب انحنای موضعی قطره در صفحه شارش و عمود بر صفحه شارش است.

عددمویینگی به صورت $Ca = \frac{\mu_c V}{\gamma}$ تعریف می‌شود.

با توجه به اینکه در فصل مشترک قطره و سیال زمینه انتقال جرم نداریم، دومین شرط مرزی، پیوستگی مولفه عمودی سرعت در مرز برطبق معادله پیوستگی(۲) برقرار است:

$$V^{(1)} = V^{(2)} \neq 0 \qquad (٤)$$

با استفاده از قضایای اول و دوم گرین، معادله دیفرانسیلی(۱) به معادله خودسازگار انتگرالی زیر تبدیل می‌گردد.

$$\bar{V}_j^{(1)}(\vec{r}_0) = \frac{1}{c_l}\oint_{\Gamma_W,\Gamma_O}[\bar{V}_j^{(1)}(\vec{r})T_{ijk}^B(\vec{r},\vec{r}_0)n_k - \qquad (۵)$$

$$f_i^{(1)}G_{ijk}^B(\vec{r},\vec{r}_0)]dl + \frac{1}{c_l}\oint_{\Gamma_{1,2}}[(1-\frac{\mu_2}{\mu_1}) +$$

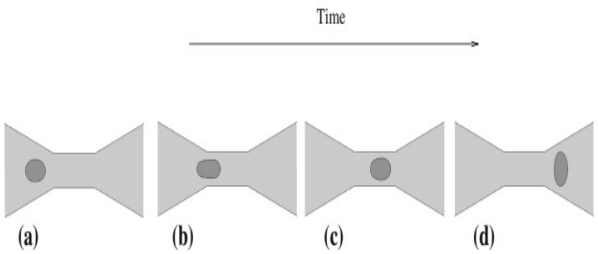
$$\bar{V}_i^{(1)}(\vec{r})T_{ijk}^B(\vec{r},\vec{r}_0)n_k - \Delta\vec{f}_i^{(1)}G_{ij}^B(\vec{r},\vec{r}_0)]dl$$

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

G_{ij}^B، P_i^B و T_{ijk}^B به ترتیب توابع گرین برینکمن سرعت، فشار و تنش سطح Γ_W و Γ_O مرز دیواره کانال، مرز ورودی و خروجی می‌باشند $\vec{r}=(x,y)$ و $\vec{r}_0=(x_0,y_0)$ به ترتیب نقاط میدان و تکینگی هستند به منظور حل عددی معادله انتگرال خودسازگار، فاز قطره–سیال زمینه و دیواره‌های کانال باید در مجموعه‌ای از عناصر مرزی یک بعدی گسسته شوند ما فاز قطره–سیال زمینه را با استفاده از روش منحنی مکعبی گسسته کردیم. این روش شیب و انحنای سراسری صاف را در نقطه انتهایی عناصر به ما می‌دهد. به این ترتیب، مرز قطره را با N گره توصیف می‌کنیم. مختصات هر عنصر به صورت پارامتریک توسط چند جمله ای درجه سه بیان می‌شود. از آنجایی که قطره سطح بسته است، از چندجمله‌ای مکعبی دوره‌ای استفاده می‌کنیم که شرایط تناوب برای مشتق اول و دوم در گره‌های اول و آخر اعمال می‌شود. بر خلاف خطوط قطرات، مرزهای ثابت مانند دیوارها و مرزهای ورودی و خروجی توسط بخش‌های مستقیم گسسته می‌شوند.

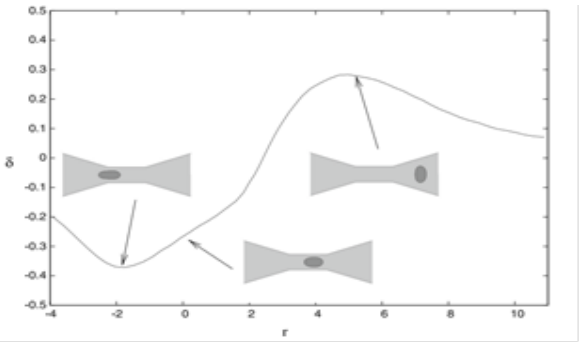
نتایج

در مطالعه حاضر، تغییر شکل قطره در میکروکانال دوبعدی همگرا به صورت عددی بررسی خواهیم کرد. یافته‌های عددی ما نشان می‌دهد که مقدار و موقعیت حداکثر تغییر شکل قطره به شدت به زاویه واگرای میکروکانال، عددمویینگی و اندازه قطرات وابسته است. در این مطالعه، ما تاثیر هندسه کانال، اندازه قطرات را بر روی حداکثر تغییر شکل قطرات بررسی و بحث می‌کنیم. شکل ۲ عکس‌های لحظه‌ای یک قطره را نشان می‌دهد که چندین بار از سمت چپ وارد میکروکانال مستقیم و واگرای قیفی می‌شود. همانطور که در شکل ۲ نشان داده شده است، تغییر شکل قطره با نسبت $\delta=(b-a)/(b+a)$ محاسبه می‌شود، که در آن a محور قطره در جهت x و b محور آن در جهت y است. واضح است که وقتی $a>b$ تغییر شکل قطره منفی است به این معنی که قطره در جهت جریان محور x کشیده می‌شود. تغییر شکل قطره به عنوان تابعی از فاصله بی بعد آن از نقطه میانی کانال مستقیم، (شکل ۱ را ببینید) $r=x^2+y^2$ محاسبه می‌شود. شکل ۳ یک منحنی تکامل معمولی δ را به عنوان تابعی از فاصله از تقاطع دو کانال، r نشان



شکل ۲ . تصاویر متوالی از جریان و تغییرشکل قطره در زمان‌های مختلف

می‌دهد. به دلیل جریان شعاعی همگرا در مجاورت محل اتصال بین عنصر همگرا و کانال مستقیم باریک، هنگامی که قطره از کانال مستقیم عبور می‌کند، به شکل بیضی مورب تغییر شکل می‌دهد که محور نیمه–اصلی a بزرگتر از نیمه–فرعی، محور b است. بنابراین تغییر شکل قطرات منفی است. با این حال، تغییر شکل قطره با ورود قطره به میکروکانال واگرا و رسیدن به حداکثر مقدار خود افزایش می‌یابد. این به دلیل تأثیر میدان جریان شعاعی واگرا در نزدیکی تقاطع کانال واگرا و کانال مستقیم است. واضح است که وقتی یک قطره به کانال واگرا می‌ریزد، یک جریان خارجی واگرا توسط قطره تجربه می‌شود. بنابراین، قطره در جهتی عمود بر جهت جریان خود تغییر شکل می‌دهد(b>a).

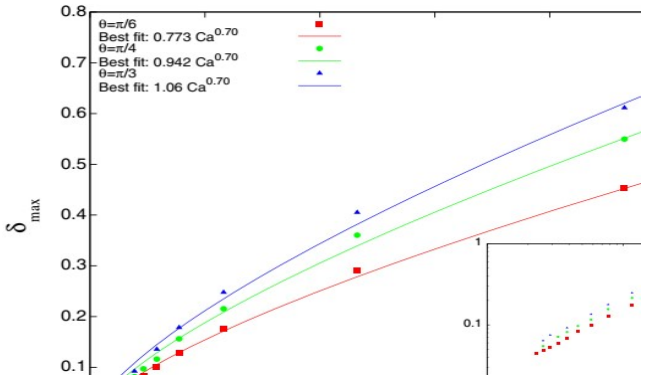


شکل ۳ . نمودار تغییر شکل قطره δ(x) در برابر موقعیت قطره r در عددمویینگی اصلاح شده $Ca^*=0.077$ و اندازه قطرات $a_d=2.01$

اثر زاویه واگرا

شکل ٤ حداکثر تغییر شکل قطرات را به عنوان تابع عددمویینگی اصلاح شده برای سه مقدار داده شده از زاویه واگرای میکروکانال نشان می‌دهد. مشاهده می‌کنیم که تغییر شکل قطره با افزایش عددمویینگی، در توافق کیفی با پیش‌بینی‌ها و آزمایش‌های نظری قبلی، افزایش می‌یابد [۷،۸].

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

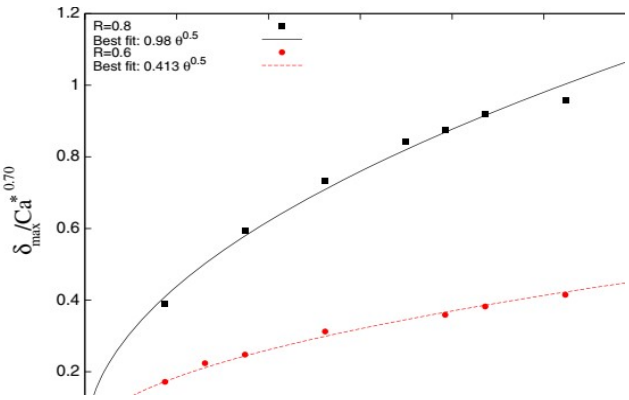


شکل ٤. حداکثر تغییر شکل قطره δmax به عنوان تابعی از عددمویینگی اصلاح شده Ca^* در مقدار داده شده اندازه قطره $a_d = 2.01$. نقاط با شکل‌های متفاوت، داده‌های عددی به دست آمده با برنامه ما هستند، در حالی که خطوط نشان دهنده تناسب عددی هر منحنی هستند. ورودی یک نمودار log-log است.

از نقطه نظر تئوری و تجربی، سرعت یک قطره به محل آن در کانال میکروسیال بستگی دارد. همانطور که در شکل ٥ نشان داده شده است، پیش فاکتور بهترینتناسب به زاویه واگرای میکروکانال، θ بستگی دارد. برای توضیح تأثیر زاویه واگرای میکروکانال بر روی حداکثر تغییر شکل قطرات، اندازه قطرات و عددمویینگی را ثابت نگه می‌داریم و سپس زاویه واگرا θ تغییر می‌دهیم. شکل ٥ حداکثر تغییر شکل قطره را به عنوان تابعی از زاویه واگرا در مقادیر داده شده اندازه قطرات وعددمویینگی نشان می‌دهد. مشاهده می‌کنیم که حداکثر تغییر شکل قطره به شدت به زاویه واگرای کانال میکروسیال بستگی دارد. خطوط توپر و نقطه‌چین بهترین تناسب عددی را برای داده‌ها به ترتیب برای $R = 0.8$ و $R = 0.6$ ارائه می‌دهند. حداکثر تغییر شکل قطرات را می‌توان با توجه به عدد مویینگی اصلاح شده و زاویه واگرا به عنوان $\delta max \propto \sqrt{\theta} Ca^{*0.70}$ تغییر داد.

نتیجه گیری

روش المان مرزی برای مطالعه عددی تغییر شکل قطرات در یک میکروکانال همگرا استفاده شد. ما یک سیستم دو بعدی دو سیال با لزجت‌های مختلف در نظر گرفته‌ایم که می‌توان آن را با مدل برینکمن توضیح داد. تغییر شکل قطره در جریان همگرا به عنوان-



شکل ٥ وابستگی حداکثر تغییر شکل قطره به زاویه واگرای میکروکانال برای مقدار داده شده عدد مویینگی اصلاح شده، $Ca^* = 0.058$، و دو مقدار اندازه قطره $a_d = 2.01$ و $a_d = 1.13$. خطوط توپر و نقطه چین بهترین تناسب را با داده‌ها نشان می‌دهد.

تابعی از عددمویینگی، اندازه قطرات و زاویه واگرای میکروکانال مورد مطالعه قرار گرفت. . ابتدا نشان داده شد که نتایج مدل برینکمن با نتایج تجربی مطابقت دارد. نتایج عددی با داده‌های تجربی به دست آمده در یک میکروکانال انبساط ناگهانی تایید شد. هنگام مقایسه بزرگی حداکثر تغییر شکل قطره، توافق خوبی بین داده‌های تجربی و عددی مشاهده شد.

مرجع‌ها

[۱] Nguyen, Nam-Trung, and Steven T. Wereley. "Fundamentals and applications of microfluidics artech house inc." *Boston, MA, USA* (2002): 354-369.

[۲] Zografos, K., et al. "*Microfluidic converging/diverging channels optimised for homogeneous extensional deformation.*" *Biomicrofluidics* **10.4** (2016): 043508.

[۳] Lettieri, Gian-Luca, et al. "A novel microfluidic concept for bioanalysis using freely moving beads trapped in recirculating flows." *Lab on a Chip* **3.1** (2003): 34-39.

[۴] Xuan, Xiangchun, and Dongqing Li. "Particle motions in low-Reynolds number pressure-driven flows through converging–diverging microchannels." *Journal of Micromechanics and Microengineering* **16.1** (2005): 62.

[۵] Khayat, Roger E., et al. "Influence of shear and elongation on drop deformation in convergent–divergent flows." *International Journal of Multiphase Flow* **26.1** (2000): 17-44.

[۶] Cunha, L. H. P., et al. "Flow of emulsion drops through a constricted microcapillary channel." *International Journal of Multiphase Flow* **103** (2018): 141-150.

[۷] Rallison, J. M. "The deformation of small viscous drops and bubbles in shear flows." *Annual review of fluid mechanics* **16.1** (1984): 45-66.

[۸] Cabral, João T., and Steven D. Hudson. "Microfluidic approach for rapid multicomponent interfacial tensiometry." *Lab on a Chip* **6.3** (2006): 427-436.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

ارتباط بین روند تغییرات طوفان در ناحیه سیستان و بلوچستان و محتوای کلی الکترون(TEC)

تاجی، بنفشه[۱]؛ معماریان، محمدحسین[۲] ؛ رستگار، سید محمد[۳]

دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد

چکیده

برخی مطالعات انجام‌شده در رابطه با اثرات پدیده‌های هواشناختی بر یون‌سپهر، نشان‌دهنده ارتباط قوی در منطقه یون‌سپهر و فاکتورهای هواشناسی بوده است که باعث ایجاد بیهنجاری‌هایی در منطقه یون‌سپهر می‌شوند. یون‌سپهر زمین قسمت بالایی جو تعریف می‌شود که وجود یونیزاسیون کافی، بر انتشار امواج رادیویی تأثیر می‌گذارد. در حالی که امواج انتشار یافته از میان جو خنثی (وردسپهر) اساساً وابسته به فشار، درجه حرارت و بخارآب است، انتشار امواج از میان یون‌سپهر اصولا متأثر از تعداد الکترون‌های آزاد در طول مسیر موج است. بر این اساس در این پژوهش به‌منظور ارتباط بین وردسپهر و یون‌سپهر به مقایسه طوفان سیستان‌و بلوچستان و محتوای کلی الکترون در همان منطقه پرداخته شده است. نتایج نشان می‌دهد تغییرات TEC با طوفان ارتباط دارد.

کلمه کلیدی: یون‌سپهر، محتوای کلی الکترون، طوفان‌های وردسپهری

Relationship between hurricane change trend in Sistan and Baluchestan region and total electron content (TEC)

Taji, Banafsheh[1]; Memarian, Mohammad Hossein [2]; Rastegar, Seyed Mohammad [3]

[1] Department of Physics, University of Yazd, Yazd,
b.taji@stu.yazd.ac.ir
memarian@yazd.ac.ir
smrastegar@stu.yazd.ac.ir

Abstract

Studies on the ionospheric meteorological phenomena program have been indicative of communication in the ionosphere and meteorological factors that cause anomalies in the ionosphere. The ionosphere of the Earth is defined as the upper part of the atmosphere, and the presence of sufficient ionization affects radio emission. While the emission through the neutral atmosphere is mainly dependent on pressure, temperature, and water vapor, the propagation of waves through the ionosphere is mainly affected by the number of free electrons along the wave path. Accordingly, in this study to correlate the atmosphere and ionosphere, the Sistan and Baluchestan storm and the total electron content in the same region have been compared.. The results show that TEC changes are related to storms.

***Keywords**: Ionosphere, total electron content, atmspheric storms*

مقدمه:

هرساله طوفان‌های مخرب و سهمگین مختلفی با سرعت‌های زیاد در نقاط مختلف کره زمین رخ می‌دهند که با خسارت‌های مالی و

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

جانی فراوانی نیز همراه می‌باشند. در سال‌های اخیر در رابطه با پیوند بین پدیده‌های هواشناختی و تغییر و تحولات یون‌سپهری، مطالعات متعددی در نقاط مختلف جهان انجام شده و نتایج جالب توجهی به‌دست آمده است. مطالعات بسیاری در راستای بررسی عوامل مؤثر در تغییرات یون‌سپهری انجام گرفته است و ارتباط تنگاتنگی میان پارامترهای هواشناختی (جو پایین) و یون‌سپهری (جو بالا) گزارش شده است. در مطالعات بسیاری تأثیرپذیری یون‌سپهر از پدیده‌های زمین‌شناختی چون زمین‌لرزه و پدیده‌های هواشناختی مانند طوفان‌ها نشان داده شده است [۱]. پوشش پلاسمایی زمین و یا به عبارتی لایه یون‌سپهر یک لایه ساده اطراف زمین نیست و پیوسته به توجه نیاز دارد. از بخش فوقانی میان‌سپهر تا ارتفاع تقریبی ۱۰۰۰ کیلومتری جو زمین، بار الکتریکی شدیدی حاکم می‌باشد که زاییده وجود یون‌ها و الکترون‌های آزاد است [۲].

یون‌سپهر بخشی از جو زمین است که در ارتفاعات بالاتر از حدود ۶۰ کیلومتر در اثر تابش خورشیدی به‌صورت پرتو X، فرابنفش و گسیل ذره‌ای ایجاد می‌شود [۳]. در اثر برهم‌کنش این تابش‌ها و جو زمین، الکترون‌ها از مولکول‌ها و اتم‌های موجود در آن ارتفاعات جدا و یونیزه می‌شوند. الکترون‌ها و یون‌های حاصل از یونیزاسیون تحت تاثیر میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی می‌توانند جابه‌جا شده و راندگی‌های متفاوتی را تجربه کنند، ساختار واقعی یون‌سپهر زمین ساده نیست [۴]. نمایه واقعی چگالی الکترون با خواص ویژه جذب اجزای گاز جو مشخص می‌شود. براین اساس تغییرات ضرایب بازترکیب و اتصال برحسب ارتفاع را باید در محاسبه منظور کرد. به‌خاطر تغییرات ارتفاعی در ترکیبات خنثی جوی و آهنگ تولید با ارتفاع، پلاسما در یون‌سپهر یک ساختار لایه‌ای قائم دارد که لایه‌ها با D، E و F مشخص می‌شود. هر لایه با فرایندهای فیزیکی مختلفی کنترل می‌شود و یون‌های اصلی مختلفی دارد. توزیع چگالی پلاسما در یون‌سپهر زمین بسیار ناهمگن است، به‌عنوان مثال، با ارتفاع، عرض و طول جغرافیایی به‌طور قابل توجهی متفاوت است [۵].

مقادیر TEC به‌طور معمول با استفاده از اختلاف فاز بین سیگنال هایی که از طریق یون‌سپهر در فرکانس‌های مختلف طی می‌شوند و با در نظر گرفتن یک مدل لایه نازک تنها برای یون‌سپهر با ارتفاع ثابت محاسبه می‌شوند با استفاده از شبکه‌ای از ایستگاه‌ها، می‌توان توزیع چگالی الکترون را در یک منطقه جغرافیایی خاص محاسبه کرد در حالی که GNSS TEC در تمام ارتفاعات ادغام شده است، اما همانطور که گفته شد، بیش‌ترین سهم در TEC عمودی از یون‌سپهر روبرو است. اگرچه اندازه‌گیری‌های digisonde (بالا) ویژگی‌های طیفی بیشتری از تغییرات را نسبت به داده‌های GNSS نشان می‌دهند [۶].

روش و اندازه‌گیری:

یون‌سپهر یکی از لایه‌های بسیار تأثیرگذار جو و یکی از اجزای مدار الکتریکی جهانی، از دیرباز به روش‌های گوناگون و از دیدگاه‌های متفاوت مورد تحقیق و بررسی قرار گرفته است. یکی از موضوع‌هایی که در سال‌های اخیر توجه بسیاری از دانشمندان را در سراسر جهان به خود جلب کرده، بررسی آثار هواشناختی در یون‌سپهر پایین است. در راستای جفت شدگی وردسپهر- یون‌سپهر ارتباط بین طوفان زمینی و تغییرات محتوای الکترونی(TEC[1]) مورد توجه قرار گرفته است. یون‌سپهر نسبت به سیگنال‌های سامانهٔ موقعیت‌یابی جهانی، یک محیط پراکنده است یعنی امواج با بسامدهای مختلف تأخیر و تقدم فازهای متفاوتی دارند. میزان این تأخیر، وابسته به مقدار محتوای کلی الکترونی لایهٔ یون‌سپهری است که با زمان تغییر می‌کند. محتوای چگالی الکترون یک مقدار توصیفی مهم برای یون‌سپهر است [۷]. TEC مجموعه الکترون‌های موجود در استوانه‌ای با سطح مقطع یک مترمربع است که در مسیر ماهواره تا گیرنده محاسبه می‌شود. TEC در تعیین تأخیر فاز امواج رادیویی اهمیت زیادی دارد و به‌شدت تحت تأثیر فعالیت خورشیدی می‌باشد.

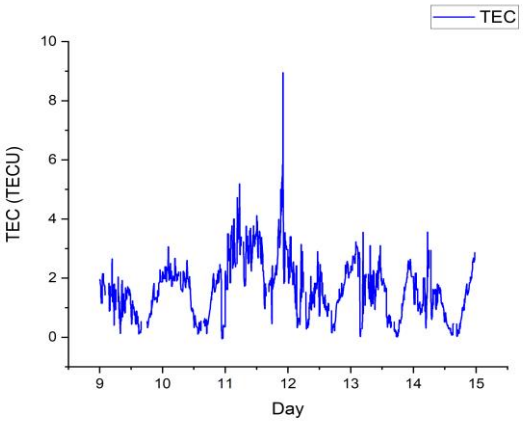
محتوای کلی الکترون یکی از پارامترهای یون‌سپهری است که زیاد مورد استفاده قرار می‌گیرد و مقدار آن برابر است با تعداد الکترون‌هایی که در یک ستون با مقطع عرضی یک متر مربع، که از زمین به سمت بالا و از میان یون‌سپهر عبور می‌کند، اگرچه TEC به‌تنهایی قادر به توصیف کامل یونیزاسیون در یون‌سپهر نیست اما می‌توان

[1] Total electron content

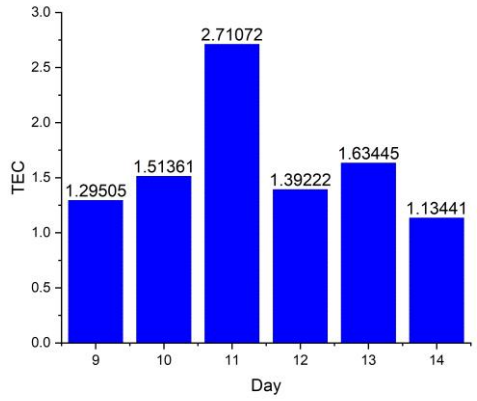
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

برای کاربردهای خاص انتشار امواج رادیویی از آن استفاده کرد. از آنجایی که TEC متناسب با تأخیر سیگنال رادیویی در یون‌سپهر است کاربران تک بسامده سامانهٔ تعیین موقعیت جهانی (GPS)، می‌توانند مشاهدات TEC را برای تصحیح سیگنال به‌کار گیرند. [۸]. در این پژوهش به مقایسهٔ طوفان سیستان و بلوچستان و محتوای کلی الکترون، پرداخته شده است. طوفان سیستان و بلوچستان در ۲۱ مرداد ۱۳۹۷ (۲۰۱۸/۰۸/۱۲) با مختصات۲۷ شمالی و ٦٢ شرقی و سرعت ۱۰۲ کیلومتر بر ساعت اتفاق افتاد که این‌طوفان نیز باعث خسارت‌های جانی و مالی زیاد و تعطیلی مدارس و ادارات دولتی شده است.

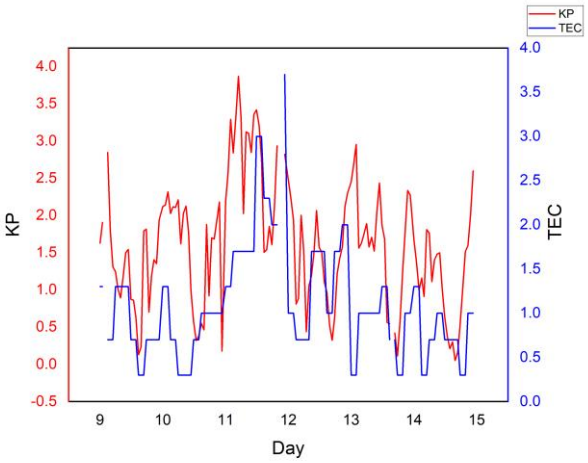
داده‌های مربوط به TEC از سایت GNSS-TEC دریافت و سری زمانیِ میزان تغییرات روزانه پارامتر TEC برای یک دوره شش روزه شامل سه روز قبل طوفان، و دو روز بعد طوفان رسم شد. داده‌های مربوط به Kp نیز به‌صورت میانگین روزانه از سایت omniweb در همین بازه زمانی به‌دست آمده است. شاخص صحیح سه ساعته K به‌عنوان اندازه‌ای از دامنه بی‌نظمی و سرعت فعالیت مغناطیسی زمان طوفان مغناطیسی معرفی می‌شود. شاخص Kp به‌عنوان یک شاخص سیاره‌ای معرفی شده است و با میانگین‌گیری از شاخص K حاصل از ۱۳ رصدخانه تحت عرض‌های شفق قطبی به‌دست می‌آید. فعالیت‌های مغناطیسی مقیاس سیاره‌ای به‌وسیله شاخص Kp اندازه‌گیری می‌شود. مقادیر Kp بیشتر از ٤ نشان‌دهندهٔ وقوع طوفان ژئومغناطیسی است که وابسته به مقدار آن، درجهٔ فعالیت طوفان نیز متفاوت خواهد بود [۹].



شکل۱. روند تغییرات TEC در زمان طوفان سیستان و بلوچستان



شکل۲. میانگین روزانه TEC



شکل۲ : مقایسه تغییراتTEC و Kp در زمان طوفان

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بحث و نتایج

در این پژوهش به بررسی طوفان وردسپهری در سیستان و بلوچستان و محتوای کلی الکترون پرداخته شده است. شکل ۱ سری زمانی پنج روزه از داده های TEC را نشان می‌دهد که محور عمودی مربوط به TEC و محور افقی سری زمانی را نشان می‌دهد. رویداد طوفان در روز ۱۲ام آگوست رخ داده است، به همین دلیل برای مشاهده روند تغییرات TEC سه روز قبل و دو روز بعد طوفان هر ۵ دقیقه یک بار دریافت شد. همانطور که از شکل ۱ دریافت می‌شود روز قبل از از طوفان مقدار TEC در حال افزایش است تا این‌که در ساعات پایانی به پیشینه خود می‌رسد در زمان طوفان و بعد ازآن مقدار TEC روند کاهشی دارد. شکل۲ از داده TEC میانگین روزانه گرفته شد، همانطور که مشاهده می‌شود بیشینه TEC به یک روز قبل از طوفان، و کم‌ترین مقدار آن مربوط به زمان طوفان است. همچنین در شکل ۳ به بررسی شاخص Kp طوفان ژئومغناطیسی و داده‌های TEC پرداخته شده است. داده‌های مربوط به Kp به‌صورت ساعتی دریافت شده که برای مقایسه از داده‌های TEC نیز میانگین ساعتی گرفته شد. همانطور که از شکل ۳ مشاهده می‌شود. TEC با طوفان ژئومغناطیسی نیز ارتباط دارد ولی با اندکی تاخیر اتفاق افتاده است لذا افت و خیز هر دو نمودار با یکدیکر همخوانی دارند. برای اطمینان از نتیجه خود از ضریب همبستگی پیرسون استفاده شد که نشان‌دهندهٔ ارتباطی مستقیم بین شاخص Kp و محتوای کلی الکترون، با ضریب همبستگی ۰/۴۹ می‌باشد. مقدار این ضریب می‌تواند بین ۱- تا ۱ باشد و در صورت عدم کامل وجود همبستگی بین دو متغیر، برابر صفر می‌شود. اگر دو متغیر با مقیاس نسبی و پیوسته و دارای رابطه خطی باشند از ضریب همبستگی پیرسون استفاده می‌شود. ضریب همبستگی پیرسون که به نام‌های ضریب همبستگی گشتاوری و یا ضریب همبستگی مرتبه صفر نیز نامیده می‌شود روشی پارامتری است که برای داده‌هایی با توزیع نرمال یا تعداد داده‌های زیاد استفاده می‌شود. این ضریب به منظور تعیین میزان رابطه، نوع و جهت رابطه‌ی بین دو متغیر، به کار برده می‌شود. اگر ضریب همبستگی برابر با ۱ باشد، بیانگر همبستگی کامل و مستقیم بین دو متغیر است، رابطه‌ی مستقیم یا مثبت به این معناست که اگر یکی از متغیرها افزایش (کاهش) یابد، دیگری نیز افزایش (کاهش) می‌یابد و اگر برابر با ۱- باشد وجود یک همبستگی کامل ولی معکوس را بین دو متغیر نشان می‌دهد. رابطه‌ی معکوس یا منفی نشان‌دهنده این است که که اگر یک متغیر افزایش یابد متغیر دیگر کاهش می‌یابد و بالعکس. اگر ضریب همبستگی برابر با صفر شود، نشان‌دهنده آن است که بین دو متغیر رابطه خطی وجود ندارد.

در نهایت از نمودارها دریافت می‌شود که تغییرات TEC و زمان رویداد طوفان با یکدیگر ارتباط دارند، و قبل از طوفان بیشینه و در زمان طوفان کم‌ترین مقدار TEC مشاهده می‌شود، از طرفی نیز تحت تاثیر طوفان‌های ژئومغناطیسی می‌باشد. در نتیجه تغییرات در یون‌سپهر به دو عامل فعالیت‌های خورشیدی و فرایندهای جو پایین بستگی دارد.

مرجع‌ها

[۱] Pulinets, Sergey, and Kyrill Boyarchuk. Ionospheric precursors of earthquakes. Springer Science & Business Media, 2004.
[۲] Shim, J. A. "Analysis of total electron content (TEC) variations in the low-and middle-latitude ionosphere." (2009).
[۳] Ratcliffe, J. A. (1972). Introduction to the ionosphere and magnetosphere. pp. 46-57.
[٤] Fleming, Eric L., Sushil Chandra, J. J. Barnett, and M. Corney. "Zonal mean temperature, pressure, zonal wind and geopotential height as functions of latitude." Advances in Space Research 10, no. 12 (1990): 11-59
[٥] Batista, I. S., Abdu, M. A., Carrasco, A. J., Reinisch, B. W., de Paula, E. R., Schuch, N. J., & Bertoni, F. (2008). Equatorial spread F and sporadic E-layer connections during the Brazilian conjugate point equatorial experiment (COPEX). Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics, 70(8–9), 1133–1143.
[٦] Bauer, S. J. (1958). An apparent ionospheric response to the passage of hurricanes. Journal of Geophysical Research, 63(1), 265–269. https://doi.org/10.1029/JZ063i001p00265
[۷] Bilitza, D., Altadill, D., Truhlik, V., Shubin, V., Galkin, I., Reinisch, B., & Huang, X. (2017). International Reference Ionosphere 2016: From ionospheric climate to real-time weather predictions. Space Weather, 15, 418–429. https://doi.org/10.1002/2016SW001593
[۸] Bishop, R. L., Aponte, N., Earle, G. D., Sulzer, M., Larsen, M. F., & Peng, G. S. (2006). Arecibo observations of ionospheric perturbations associated with the passage of Tropical Storm Odette. Journal of Geophysical Research, 111, A11320. https://doi.org/10.1029/2006JA011668
[۹] Cervera, M. A., & Harris, T. J. (2014). Modeling ionospheric disturbance features in quasi-vertically incident ionograms using 3-D magnetoionic ray tracing and atmospheric gravity waves. Journal of Geophysical Research: Space Physics, 119(1), 431–440. https://doi.org/ 10.1002/2013JA019247, R

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

طراحی و ساخت سامانه آب شیرین‌کن خورشیدی گرمایی- تقطیری

فولادوند ، م. ابراهیم[۱]؛ کرمی، رسول[۲] زارع، حمید رضا[۳]

[۱] گروه فیزیک دانشگاه زنجان ، بلوار دانشگاه ، زنجان

[۲] دانشجوی دکتری، گروه فیزیک دانشگاه زنجان ، بلوار دانشگاه ، زنجان

[۳] دانشجوی کارشناسی، گروه فیزیک دانشگاه زنجان ، بلوار دانشگاه ، زنجان

چکیده

یک سامانه‌ی آب شیرین‌کن خورشیدی گرمایی- تقطیری طراحی و ساخته شده است. نخست بخشهای سامانه معرفی می‌شود که شامل یک دیش شلجمی متمرکزکننده نور خورشید، یک بخارساز و یک بخش چگالنده است. دیش نور خورشید و گرمای آن را در ناحیه کانونی خود متمرکز می‌کند. یک بخارساز (ظرف استیل) در ناحیه کانونی گذاشته می‌گردد تا آب شور موجود در خود را به کمک گرمای نور کانونی شده بخار کند. بخار ساز به یک چگالنده وصل می‌شود که با گرفتن گرمای بخار خروجی بخار ساز، آن را تقطیر می‌کند و قطره‌های آب شیرین شده در یک ظرف گردآوری می شود. در پایان، نتایج اندازه‌گیری‌های تجربی گزارش شده است.

واژه‌های کلیدی: آب شیرین‌کن- دیش خورشیدی- بخارساز- تقطیر- چگالنده.

Design and construction of solar thermal water distiller

Foulaadvand, M. Ebrahim[1]; Karami, Rasoul[2]; Zareh, Hamid Reza[3]

[1] Department of Physics, University of Zanjan, Zanjan,
[2] Ph.D student, Department of Physics, University of Zanjan, Zanjan,
[3] Bachelor student, Department of Physics, University of Zanjan, Zanjan,

Abstract

We have designed and constructed a concentrating solar system which desalinates saline water. The system consist of a parabola concentrating dish of diameter 1.8 m. The dish tracks the Sun by a manual manner. The reflective surface is glass mirror which has been piece wisely glued on the surface of a fiber-glass communication dish. A metallic evaporator is fabricated and placed at the dish focal area. The emergent vapor is passed through a copper pipe which condensate the vapor in the drops.

Keywords: *concentrating dish- drinking water- evaporator- condenser- distillation*

PACS No 42-44-89

مقدمه

با توجه به کمبود آب شیرین در جهان، امروزه بسیاری از کشورها در پی شیرین‌سازی آب شور به روش‌های گوناگون هستند تا بتوانند نیازهای آبی خود را تامین کنند. با وجود منابع بزرگ آب شور مانند اقیانوس‌ها، دریاها یا چشمه های محلی در مناطق خشک و کویری، صنعت شیرین سازی آب یک راه حل منطقی و مطمئن برای حل مشکل کمبود آب آشامیدنی و آب سالم برای کشاورزی و صنایع به شمار می آید. آب شور به خاطر نمک موجود در خود برای استفاده نیازمند انرژی و اعمال فرایندهایی است تا آشامیدنی شود. شیرین‌سازی آب در مقیاس های بزرگ و کوچک خانگی و صنعتی قابل اجرا است. بکارگیری انرژی خورشید برای تولید آب شیرین یک رویکرد مناسب برای

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

صرفه‌جویی در مصرف انرژی برق و بهره گیری از چشمه های انرژی تجدیدپذیر بجای سوخت‌های فسیلی تجدیدناپذیر و آلاینده طبیعت است. کشور کم آب ما ایران هم زیر تاثیر شرایط اقلیمی، زیست محیطی و جمعیتی با تنش تامین آب شیرین مورد نیاز آشامیدنی، صنعت و کشاورزی در بسیاری از مناطق روبرو می‌باشد. اما از سویی دیگر ایران دارای پتانسیل بالای انرژی خورشیدی با میانگین ساعات آفتابی بیشتر از ۲۸۰۰ ساعت در سال و شدت تابش بیش از ۱۸۰۰ کیلووات ساعت بر مترمربع در سال است. ازین رو آب شیرین‌کن‌های خورشیدی سازگار با محیط زیست، می‌توانند به عنوان راهکاری مناسب در راستای توسعه پایدار و تامین آب مورد نیاز، برای نمک‌زدایی از آب‌های شور در کشور بکار روند. روش خورشیدی نسبت به دیگر روش های متعارف آب شیرین‌سازی (مانند نانوفیلتراسیون و اسمز وارونه، تقطیر چند مرحله‌ای و غیره) دارای فناوری ساده‌تر، ارزان‌تر و دارای سازگاری بهتر با شرایط اقلیمی ایران می‌باشد [۱].

یکی از رایج‌ترین شیوه‌های بهره‌برداری از انرژی خورشیدی، متمرکز کردن پرتوهای خورشید در ناحیه‌ای کوچک است. برای این کار گردآور (کالکتور) های خورشیدی گوناگونی مانند دیش‌های خورشیدی شلجمی و کروی، گردآورهای شلجمی خطی، و نیز گردآورهای تخت فرنل ساخته شده‌اند [۲]. سطح این دیش‌های آیینه‌ای را، بیشتر کروی و یا شلجمی(سهمی‌گون) می‌گیرند. اندازه گرمای جمع شده با شدت کانونی شدن پرتوهای خورشیدی در این متمرکز کننده‌ها متناسب است و ایجاد کانون پرشدت، هدف مطلوب در این فناوری است. این گرمای متمرکز شده کاربردهای فراوانی مانند تولید الکتریسیته، بخار آب، گرمای صنعتی، سم‌زدایی و گندزدایی پساب، آب شیرین‌کن، تولید هیدروژن سوختی و کاربردهای دیگر دارد [۳]. البته در آب شیرین‌کن‌های خورشیدی به دلیل این که تنها انرژی دریافتیشان از خورشید می‌باشد، بازدهی سامانه در پی تغییر شرایط آب و هوایی مانند ابری شدن آسمان پایین می‌آید و به همین دلیل بیشتر آب شیرین‌کن‌های خورشیدی موجود از بازده پایینی برخوردار هستند یا برای همه نقاط زمین مناسب نیستند. ما به منظور افزایش بازدهی تولید آب شیرین‌کن خورشیدی و کاهش هزینه تولید و نگهداری آن، یک سامانه آب شیرین‌کن خورشیدی گرمایی با متمرکزکننده دیش خورشیدی ساخته ایم. در ادامه این سامانه و تولید آب شیرین با آن را بررسی و گزارش می‌کنیم. در زیر به شرح بخش های سامانه می‌پردازیم.

دیش خورشیدی متمرکز کننده نور و گرما

یک متمرکز کننده شلجمی با دریافت نور خورشید روی سطح خود و بازتاب آن روی یک ناحیه کوچک در کانون خود باعث افزایش شار تابشی در آنجا می‌شود. در این کانون، یک ظرف بخارساز حاوی آب شور قرار می‌گیرد. آب شور درون بخارساز با دریافت گرمای ناحیه کانونی بخار شده و بخار آب به بخش چگالنده وارد می‌گردد که عمل تقطیر بخار آب در آن انجام می‌شود. دیش متمرکز کننده یک دیش مخابراتی از جنس فایبر گلاس است. سطح دیش با آینه‌های نازک و انعطاف‌پذیر پوشانده شد. با اهرم‌هایی که پشت دیش قرار دارد می‌توان آن را به صورت دستی رو به خورشید نهاد تا تمرکز نور آفتاب انجام شود. نور مستقیم آفتاب باید موازی با محور اپتیکی دیش بر آن بتابد تا بیشترین تمرکز نور را در کانون داشته باشیم. به دلیل حرکت ظاهری خورشید در آسمان، لازم است پیکر بندی دیش بصورت دستی در هر دو دقیقه یکبار تنظیم شود.



شکل ۱: دیش خورشیدی دانشگاه زنجان

طراحی و ساخت بخارساز

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

پس از ساخت دیش گام بعدی طراحی و ساخت ظرف ویژه برای جوشاندن آب و تولید بخار یا همان بخارساز خورشیدی بود. برای این کار جنس آلیاژ استیل را برای ظرف بکار بردیم تا هم دمای بالای نور کانونی شده را تاب آورد و نسوزد و یا ذوب نشود و هم اینکه با نمک‌ها و اسیدهای موجود در آب شور واکنش ندهد و خورده نشود. در شکل۲ تصویر بخارساز را می‌بینید که به شکل یک مخزن استوانه‌ای با قطر نه سانتیمتر و بلندی بیست سانتیمتر با درپوش و دو شیر آب مناسب ساخته شد. گنجایش بخارساز یک لیتر هست. نور کانونی شده به سطح زیرین استوانه برخورد می‌کند. دو شیر آب در بخارساز کارگزارده شده است که یکی برای ورود آب شور سرد و یا خروج آب گرم در مواقع لازم و دیگری برای خروج بخار آب تولید شده استفاده می‌گردد. می‌توان برای جذب بیشینه‌ی نور کف ظرف آن را با مواد جاذب نور لایه‌نشانی کنیم.



شکل۲: ظرف بخارساز از جنس استیل و شیر های روی آن

سپس مطابق شکل ۳ نصب این بخارساز با کمک نگهدارنده در کانون دیش و تنظیم نور کانونی شده روی آن انجام شد. به دلیل گرمای بالایی در کانون تولید می‌شود باید با دستمال و یا پوشش مناسب دیگری با بخارساز کار کرد تا از سوختگی جلوگیری کند.



شکل۳: نصب و تنظیم بخارساز در محل کانون دیش خورشیدی

مقداری گرما بیشتر با سازوکار همرفتی و کمی هم با سازوکار تابشی توسط ظرف بخارساز نگهداره‌ی خود به هوای محیط اطراف داده می‌شود. برای جلوگیری از این هدررفت گرما، بخارساز را با مواد عایق گرما مانند پشم سنگ و پشم شیشه پوشاندیم.

بخش چگالنده و قطره ساز سامانه

برای تقطیر بخار آب خروجی از بخارساز، با توجه به رسانندگی خوب آلومینیوم و مس ابتدا یک لوله‌ی باریک آلومینیومی به درازای دو متر و قطر یک سانتی متر به شیر خروجی بخارساز متصل شد. گرمای بخار آب خروجی هنگام شارش در لوله آلومینومی به هوای پیرامون خود پس داده شده و فرایند تقطیر رخ می‌دهد. قطره های آب را در یک ظرف جمع آوری می‌کنیم و بدین سان آب مقطر تولید می‌شود. نمک ها و دیگر مواد ته نشین شده در طرف بخار ساز را پس از یک روز استفاده از سامانه باید با شستشوی ظرف بیرون داد. برای افزایش کارایی تقطیر بخار، یک تقطیرکننده آبی نیز ساختیم و به انتهای لوله آلومنیومی وصل کردیم. برای اینکار حدود یک متر لوله مسی را بصورت مارپیچ درآورده و درون سطلی از آب قرار دادیم تا به سرمایش و تقطیر بخار آب کمک کند. البته برای مقدار زیاد بخار می‌توان تقطیرکننده‌های هوایی دارای فن خنک‌کننده برقی را هم بکار برد.



شکل۴: قسمت خنک کننده آبی و تقطیرکننده بخار آب در چگالنده

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

نتایج تجربی

مساحت دهانه متمرکز کننده دایره‌ای به قطر یکصد و هفتاد سانتی‌متری حدود دو و سه دهم متر مربع است. اندازه‌گیری‌های ما نشان داد در ماه اردیبهشت این سامانه در مدت پانزده دقیقه یک لیتر آب را می‌جوشاند و در دو ساعت و نیم همه آن را به بخار آب و سپس به آب مقطر تبدیل می‌کند. با افزودن مقدار استانداردی از کلسیم و منیزیم به آب مقطر می‌توانیم آب آشامیدنی با کیفیت تولید کنیم. برای بدست آوردن بازده سامانه نخست اندازه گرمای لازم برای تبخیر یک لیتر آب بیست درجه را بدست می-آوریم:

$$Q_u=mc\Delta\theta+mL_v=4200\times80+2.26\times10^6=2.6\times10^6 \quad (۱)$$

چنانچه شدت تابش خورشید را ۶۵۰ وات بر متر مربع بگیریم در مدت دو ساعت و نیم کل انرژی تابشی رسیده به دیش میشود:

$$Qtot= ۲٫۳\times۶۵۰\times۲/۵\times۳۶۰۰=۱.۴\times10^7 \quad (۲)$$

بازدهی دیش می‌شود:

$$\eta=۲۱٪ \quad (۳)$$

این متمرکز کننده مربع می‌تواند به شرط مجهز شدن به سامانه ردیابی خورشید روزانه دست کم آب آشامیدنی مصرفی یک خانوار یعنی حدود شش لیتر آب نوشیدنی تولید کند.

نتیجه گیری

ما یک دستگاه آب شیرین‌کن خورشیدی با متمرکزکننده‌ی آینه‌ای طراحی کرده و ساختیم. این سامانه می‌تواند آب شور را بخار کرده و بخار آب را که دیگر نمک ندارد با کمک یک بخش چگالنده به آب مقطر قابل مصرف در صنایع و آب آشامیدنی تبدیل کند.

سپاسگزاری

از همکاری ارزشمند جناب آقای حسنی کارشناس رصدخانه دانشگاه زنجان صمیمانه سپاس گزاری می‌کنیم. از دانشجویان کارشناسی ارشد رشته معماری دانشگاه زنجان خانم‌ها هدی مرادی و سپیده کرمی قدردانی می‌نماییم.

مرجع‌ها

[۱] پیرکندی، جاماسب؛ کسایی، فرشاد؛ مروری بر مطالعات انجام شده روی آب شیرین کن؛ *فصل نامه انرژی های تجدید پذیر و نو*، سال ۷، شمارهٔ ۲ پاییز و زمستان۱۳۹۸ ، صفحه ۱۰۴ تا ۱۱۹.

[۲] متشکر، ندا و فرهادیان، مهرداد و معتمدی، آرتمیس،۱۳۸۸،ضرورت بکارگیری آب شیرین کن های خورشیدی جهت تأمین آب مورد نیاز کشور در راستای توسعه پایدار،دومین سمپوزیوم بین المللی مهندسی محیط زیست،تهران،https://civilica.com/doc/۷۷۱۹۲

[3] D. Jafrancesco, P. Sansoni, F. Francini, G. Contento, C. Cancro, C. Privato, G. Graditi et al. "Mirrors array for a solar furnace: Optical analysis and simulation results." *Renewable energy* **63** (2014): 263-271.

[4] J. Alda " Paraxial optics." *Encyclopedia of Optical Engineering*" (2003):1920-1931.

[5] R. Fitzpatrick,."*Electromagnetism and Optics*". University of Texas at Austin (1981)

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی تاثیر ۵% ناخالصی مغناطیسی آهن بر خواص اپتیکی دی اکسید تیتانیوم و تعیین عدد آبه

بدیعیان باغ سیاهی، فاطمه

دانشکده علوم پایه ، دانشگاه کوثر بجنورد،بجنورد

چکیده

در این پژوهش، خواص الکترونیکی و اپتیکی دی اکسید تیتانیوم خالص و آلاییده با ۵% ناخالصی آهن به روش تئوری تابعی چگالی شبیه سازی و بررسی شده است. بررسی چگالی حالتهای انرژی نشان می دهد که جایگزینی آهن به جای تیتانیوم سبب ایجاد حالتهای جدیدی در گاف انرژی دی اکسید تیتانیوم و ایجاد خاصیت مغناطیسی نمونه می شود. بررسی قسمت موهومی تابع دی الکتریک نشان می دهد که ناخالصی آهن منجر به ایجاد دو لبه جذب جدید در محدوده فرابنفش میانه و دور می شود که در منحنی ضریب شکست نیز قابل مشاهده هستند. همچنین عدد آبه دی اکسید تیتانیوم نیز با افزودن ناخالصی آهن کاهش یافته و در نتیجه پاشندگی آن افزایش می یابد.

واژه های کلیدی: ناخالصی مغناطیسی، خواص اپتیکی، دی اکسید تیتانیوم، ، تابع دی الکتریک، ضریب شکست، عدد آبه.

Effect of 5% Fe impurity on optical properties of TiO2 and defining the Abbe number

Fatemeh, Badieian Baghsiyahi

[1] *Department of science, Kosar University of Bojnord, Bojnord,*

Abstract

In this work, we investigate the electronic and optical properties of bulk TiO_2 and Fe doped TiO_2 simulated by DFT. The partial density of states shows that the replacement of iron with titanium creates new states in the energy gap of titanium dioxide and cause the sample to show magnetic property. The imaginary part of the dielectric function of the samples shows that the iron impurity leads to the creation of two new absorption edges in the middle and far ultraviolet radiation, which are also visible in the refractive index curve. Also, the Abbe number of titanium dioxide decreases with the addition of iron impurities and as a result, its dispersion increases.

***Keywords**: magnetic impurity, optical properties, TiO_2, dielectric function, , refractive index, Abbe number*

PACS No. *42,71*

مقدمه

دی‌اکسید تیتانیوم (TiO_2) به دلیل ویژگی‌های برجسته‌ای که دارد، در میان اکسیدهای فلزی مختلف به عنوان کاندیدای نخست برای کاربردهای فوتوکاتالیستی شناخته می‌شود. همچنین به دلیل عدم تمایل در برهم‌کنش‌های شیمیایی و بیولوژیکی، سمی نبودن و پایداری طولانی در برابر خوردگی‌های شیمیایی و نوری به عنوان یک ماده ایده‌آل کاربردهای مختلفی دارد [۱] .

دی‌اکسید تیتانیوم کاربردهای ارزشمندی در LED ، حسگرهای گازی، بازتابنده‌های گرمایی، سلول‌های خورشیدی و غیره دارد. دو مشکل عمده که کاربردهای این ماده را محدود می‌کند عبارتند از گاف نواری پهن و باز ترکیب سریع زوج الکترون- حفره‌های خلق نوری. بنابراین، مطلوب است که اصلاح ساختار نواری دی‌اکسید تیتانیوم برای بهبود عملکرد این ماده صورت پذیرد [۳-۱].

مشاهده رفتار مغناطيسي دي‌اکسيد تيتانيوم آلاييده به فلزات واسطه با دماي کوري بالاتر از دماي اتاق، پژوهشگران را به سمت بررسي‌هاي بيشتر نظري و آزمايشگاهي فعاليت‌هاي فوتوکاتاليستي و ويژگي‌هاي الکتروني دي‌اکسيد تيتانيوم آلايش شده با فلزات واسطه سوق داده است[۲].

دي‌اکسيد تيتانيوم به صورت طبيعي در سه ساختار آناتاز، روتايل و بروکايت وجود دارد[۴]. به دليل معايبي چون عدم فعاليت فوتوکاتاليستي در برابر نور مرئي که از گاف نواري پهن آن نشأت مي‌گيرد و همچنين بازترکيب سريع الکترون-حفره‌هاي خلق نوري، کاربردهاي دي‌اکسيد تيتانيوم در اهداف فوتوکاتاليستي محدود شده است[۲]. بنابراين يکي از مهم‌ترين اهداف پژوهشي در زمينه فوتوکاتاليست‌هاي برپايه دي‌اکسيد تيتانيوم، گسترش پاسخ نوري آن به ناحيه مرئي با بهره بالا در تمام گستره جذبي نور

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

است. بنابراین آلایش کاتیونی با فلزات واسطه موضوعی است که برای بررسی و پژوهش بسیار ارزشمند است.

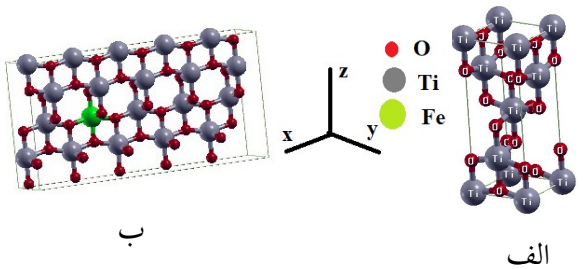
آلایش اکسید تیتانیوم با عناصر فلزی یکی از روش‌هایی است که برای اصلاح ساختار نواری دی‌اکسید تیتانیوم به کار گرفته می‌شود. درمیان آلایش‌های فلزی مختلف از قبیل Mn ، Cr ، Cu ، Ni ، Fe و غیره ، آهن به عنوان یکی از بهترین گزینه‌ها به دلیل سیمای الکترونی نیمه پر و شعاع تقریباً یکسان با عنصر Ti شناخته می‌شود [۵تا۷]

روش محاسباتی

برای انجام محاسبات از روش محاسبات ابتدا به ساکن نظریه تابعی چگالی در غالب بسته نرم افزاری سایستا (SIESTA) استفاده شده است. محاسبات با استفاده از مجموعه پایه DZP در تقریب شبه پتانسیل شیب تعمیم یافته (GGA) انجام شده است. آزمون همگرایی انرژی کل با استفاده از انرژی قطع ۲۰۰ریدبرگ انجام شده است و محاسبات تا رسیدن به 0.01 eV/Å ادامه یافته است. مش بندی فضای وارون بر اساس روش مونخارست-پک با مقادیر 10× 10×20 انجام شده است.

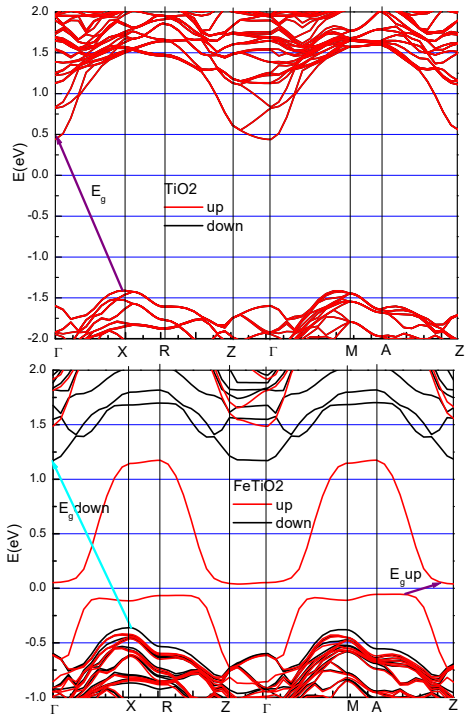
برای محاسبات اپتیکی از گزینه polycrystalاستفاده شده است که روی تمام جهات بلوری میانگین گیری می کند. بازه انرژی برای رسیدن به حدود یک برای f-sum rule در مورد دی اکسید تیتانیوم خالص بین 0- 6 Ry با پهن شدگی 0.035 Ry انتخاب شده است و برای دی اکسید تیتانیوم آلاییده با آهن 0-7 Ry با پهن شدگی 0.02 Ry در نظر گرفته شده است.

در شکل ۱-الف سلول یکه ساختار آناتاس دی اکسید تیتانیوم نمایش داده شده است. همانطور که مشاهده می شود در این سلول ۴ اتم تیتانیوم و ۸ اتم اکسیژن وجود دارد. ثابتهای شبکه بهینه شده برابر (3.785,3.785,9.502) آنگستروم است. برای اینکه ۵درصد ناخالصی آهن به جای تیتانیوم جایگذاری کنیم یک سوپرسل مشابه شکل ۱-ب استفاده کرده ایم که از ۵ برابر کردن سلول یکه در راستای محور x به دست آمده است و شامل ۱۹ اتم تیتانیوم، یک اتم آهن و ۴۰ اتم اکسیژن است.



شکل۱: سلول یکه و سوپر سل دی اکسید تیتانیوم.

ساختار نواری، چگالی حالتهای انرژی و شکل بالاترین اوربیتالهای اشغال شده (HOMO) و پایین ترین اوربیتالهای خالی (LUMO) نمونه ها را در شکلهای ۲ تا ۴ مشاهده می کنید.

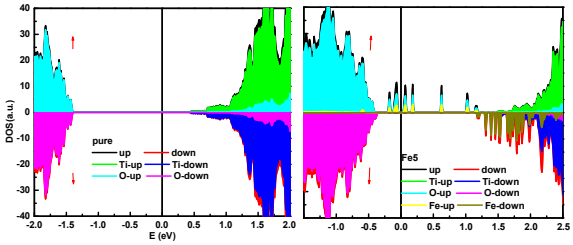


شکل ۲: ساختار نواری دی اکسید تیتانیوم خالص و آلاییده

در ساختار نواری دی اکسید تیتاتیوم خالص، نوارهای مربوط به اسپین بالا و پایین کاملا منطبق بر هم هستند که نشان می دهد این ترکیب در حالت عادی خاصیت مغناطیسی ندارد. تقارن چگالی حالتهای انرژی در شکل ۳ نیز این موضوع را تایید می کند. همانطور که در شکل ۲ قابل مشاهده است گاف انرژی غیر مستقیم است و حدود 1.85eV به دست آمده است.

در مورد دی اکسید تیتانیوم آلاییده مشاهده می شود که در مورد نوارهای اسپین بالا، چند حالت جدید در اطراف تراز فرمی ایجاد شده است که مطابق نتایج مربوط به چگالی حالتهای انرژی در شکل ۳ ناشی از اتمهای آهن می باشد. به این ترتیب گاف انرژی در حالت اسپین بالا به شدت کاهش یافته و به 0.103 eV می رسد. گاف انرژی نوارهای اسپین پایین نیز کاهش یافته و به 1.5 eV می رسد.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

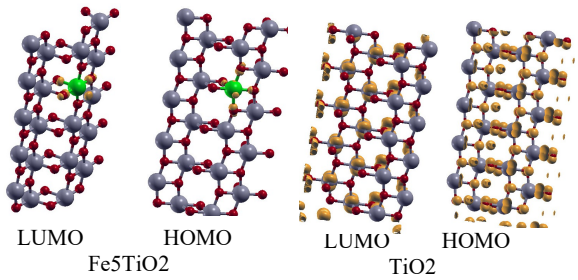


شکل۳: چگالی حالتهای انرژی جزیی

عدم تقارن چگالی حالتهای انرژی مربوط به حالتهای اسپین بالا و پایین در اطراف تراز فرمی که در شکل ۳ نیز واضح تر قابل مشاهده است نشان دهنده ایجاد خاصیت مغناطیسی در نمونه آلاییده است.

چگالی حالتهای جزیی در شکل ۳ نشان می دهد که در دی اکسید تیتانیوم خالص حالتهای ظرفیت ناشی از اوربیتالهای پر شده اکسیژن هستند و سهم غالب در حالتهای رسانش ناشی از اوربیتالهای تیتانیوم است. این موضوع در شکل ۴ نیز به وضوح قابل مشاهده است. همانطور که در شکل ۴ دیده می شود اوربیتالهای اشغال شده در اطراف اتمهای اکسیژن قرار دارند و اوربیتالهای رسانش در اطراف اتمهای تیتانیوم هستند.

در مورد دی اکسید تیتانیوم آلاییده با آهن همانطور که در شکل ۳ و ۴ مشاهده می شود حالتهای رسانش نتیجه برهم کنش آهن با اکسیژنهای اطرافش می باشند.



شکل۴: شکل بالاترین اوربیتالهای اشغال شده (HOMO) و پایین ترین اوربیتالهای خالی (LUMO)

جدول ۱: گاف انرژی دی اکسید تیتانیوم خالص و آلاییده

E_g(eV)	up	down
TiO2	۱٫۸۵	۱٫۸۵
FeTiO2	۰٫۱۰۳	۱٫۵

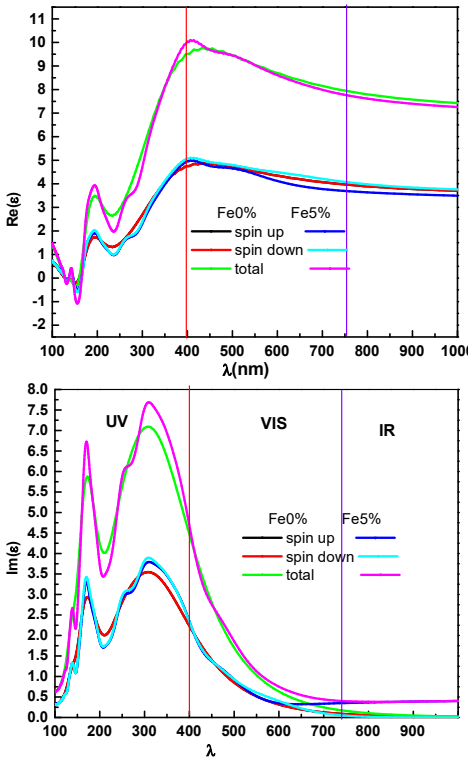
در ادامه به بررسی تاثیر حالتهای اسپینی روی قسمت موهومی تابع دی الکتریک و ضریب شکست دو نمونه پرداخته ایم. در مورد تابع دی الکتریک و ضریب شکست داریم[۸و۹]:

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + i\,\varepsilon_2 \qquad (۱)$$

$$\varepsilon^{tot} = \varepsilon^{\uparrow} + \varepsilon^{\downarrow} \qquad (۲)$$

$$n = \left[\frac{\sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2} + \varepsilon_1}{2}\right]^{\frac{1}{2}} \qquad (۳)$$

در روابط بالا εتابع دی الکتریک است و نماد ۱ و ۲ معرف قسمت حقیقی و موهومی آن هستند. با توجه به اینکه نمونه آلاییده خاصیت مغناطیسی دارد اثر اسپین را نیز در تعیین ضرایب دی الکتریک و ضریب شکست در نظر گرفته ایم [۹]. طبق رابطه ۲ تابع دی الکتریک کل برای هر یک از قسمتهای موهومی جمع تابع دی الکتریک مربوط به حالتهای اسپین بالا و پایین است. در شکل ۵ قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک برای دو نمونه نشان داده شده است.



شکل ۵: قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک

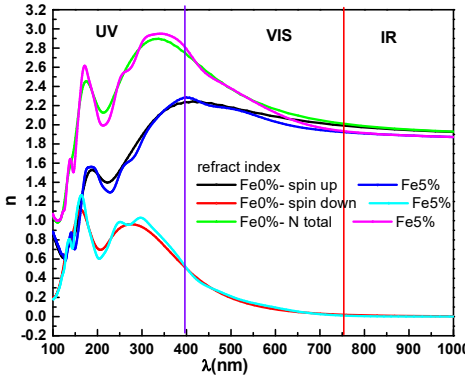
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی قسمت موهومی تابع دی الکتریک نمونه ها نشان می دهد که ناخالصی آهن منجر به ایجاد دو لبه جذب جدید در محدوده فرابنفش میانه و دور می شود که در منحنی ضریب شکست شکل ۶ نیز قابل مشاهده هستند. رفتار تابع دی اکتریک و ضریب شکست شبیه سازی شده بسیار مشابه نتایج تجربی به دست آمده در مراجع ۱۰، ۱۱ و ۱۲ است.

با استفاده از منحنی ضریب شکست می توان عدد آبه که یکی از فاکتورهای اصلی در معرفی خواص مواد اپتیکی است را تعیین کرد. با توجه به تعریف عدد آبه داریم [۱۳]:

$$\upsilon = \frac{n_d - 1}{n_F - n_C} \qquad (۴)$$

در این رابطه n_d ، n_F و n_C به ترتیب ضریب شکست ماده در طول موج خط d هلیم، خط *F* هیدروژن و خط *C* هیدروژن هستند که در جدول ۲ مشخص شده اند. البته عدد آبه دی اکسید تیتانیوم بسیار کوچک تر از عدد آبه شیشه های اپتیکی مرسوم است که نشان دهنده میزان پاشندگی نوری زیاد آن است. همچنین افزودن ناخالصی آهن باعث کوچکتر شدن بیشتر عدد آبه دی اکسید تیتانیوم می شود .



شکل ۶: منحنی ضریب شکست دی اکسید تیتانیوم خالص و آلاییده.

جدول۲: عدد آبه دی اکسید تیتانیوم خالص و آلاییده

عدد آبه	خط C	خط d	خط F	
	۶۵۶/۳	۵۸۷/۶	٤٨٦/١	طول موج(nm)
۳/۵۹۸۰۷۸	۲/۰۹۰۱٤	۲/۱۷۹۰۹	۲/٤١٧٨٤	نمونه خالص
۲/۹۳۰۲۳۳	۲/۰۲۲۷۱	۲/۱۵۳۷۵	۲/٤١٦٤٥	نمونه آلاییده

نتیجه گیری

در این پژوهش، نمونه بالک دی اکسید تیتانیوم با ۵% ناخالصی آهن آلاییده شده است. بررسی چگالی حالتهای انرژی نشان می دهد که جایگزینی آهن به جای تیتانیوم سبب ایجاد حالتهای جدیدی در گاف انرژی دی اکسید تیتانیوم می شود. علاوه بر این ناخالصی آهن باعث ایجاد خاصیت مغناطیسی نمونه نیز می شود. بررسی قسمت موهومی تابع دی الکتریک نمونه ها نشان می دهد که ناخالصی آهن منجر به ایجاد دو لبه جذب جدید در محدوده فرابنفش میانه و دور می شود که در منحنی ضریب شکست نیز قابل مشاهده هستند. همچنین عدد آبه دی اکسید تیتانیوم نیز با افزودن ناخالصی آهن کاهش یافته و در نتیجه پاشندگی آن افزایش می یابد.

مرجع‌ها

[1] Sunil Babu Eadi, Sungjin Kim, Soon Wook Jeong, and Heung Woo Jeon, "Novel Preparation of Fe Doped TiO2 Nanoparticles and Their Application for Gas Sensor and Photocatalytic Degradation", Advances in Materials Science and Engineering Volume 2017, Article ID 2191659, 6 pages

[2] Mahboubeh Yeganeh, Maliheh Mousavi, "Effects of Fe and Ni Co-Doping on the Optical Properties of TiO2 Thin Films", International Journal of Nanoscience Vol. 19, No. 1 (2020) 1850046 (8 pages)

[3] L J Kusumawardani and Y Syahputri1, "Study of structural and optical properties of Fe(III)-doped TiO2 prepared by sol-gel method", IOP Conf. Series: Earth and Environmental Science 299 (2019) 012066

[4] Sevda Jafari, Baharak Mahyad, Hadi Hashemzadeh, Sajjad Janfaza, Tooba Gholikhani, Lobat Tayebi, "Biomedical Applications of TiO2 Nanostructures: Recent Advances", International Journal of Nanomedicine 2020:15 3447–3470

[5] Abderrahim El Mragui, Yuliya Logvina, Luís Pinto da Silva, Omar Zegaoui and Joaquim C.G. Esteves da Silva, "Synthesis of Fe- and Co-Doped TiO2 with Improved Photocatalytic Activity Under Visible Irradiation Toward Carbamazepine Degradation", Materials 2019, 12, 3874

[6] Muhammad Saqib Khan, Jehanzeb Ali Shah, Nadia Riaz, Tayyab Ashfaq Butt, Asim Jahangir Khan, Walid Khalifa, Hatem Hassin Gasmi, Enamur Rahim Latifee, Muhammad Arshad, Ahmed Abdullah Alawi Al-Naghi, Anwar Ul-Hamid, Muhammad Arshad 5,* and Muhammad Bilal, "Synthesis and Characterization of Fe-TiO2 Nanomaterial: Performance Evaluation for RB5 Decolorization and In Vitro Antibacterial Studies", Nanomaterials 2021, 11, 436

[7] Devi Indah Anwar, Dikdik Mulyadi, "Synthesis of Fe-TiO2 Composite as a Photocatalyst for Degradation of Methylene Blue", Procedia Chemistry 17 (2015) 49 – 54

[8] A.A. Ramanathan, J. M. Khalifeh, "Electronic, magnetic and optical properties of $XScO_3$ (X=Mo, W) perovskites", PeerJ Materials Sciences(2021) 1-15.

[9] W. Tong, H. Ding, Y. Gao, S. Gong, X. Wang, C. Duan, "Spin dependent optical response of multiferroic EuO: First-principles DFT calculations", PRB 89 (2014) 064404.

[10] G. E. Jellison, L. A. Boatner, J. D. Budai, B. S. Jeong, D. P. Norton, "Spectroscopic ellipsometry of thin film and bulk anatase (TiO_2)", J. Appl. Phys., 93(2003) 9537-9541.

[11] A. Bendavid, P. J. Martin, "Review of thin film materials deposition by the filtered cathodic vacuum arc process at CSIRO", Journal of the Australian Ceramics Society, 50 (2014) 86-101.

[12] D. Wojcieszak, M. Mazur, D. Kaczmarek, et. Al., "Effect of the structure on biological and photocatalytic activity of transparent titania thin-film coating", Materias Science-Poland, 34 (2016) 856-862.

[۱۳] "طراحی دستگاههای اپتیکی" وارن ج. اسمیت، پژوهشکده اپتیک اصفهان.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی تجربی برخی خواص فیزیکی نانوذرات هگزافریت استرانسیم سنتز شده به روش سل_ژل

آذرنوش، اسماعیل[۱]؛ داورپناه، عبدالمحمود[۱]؛ رخشانی اول، سجاد[۲]؛
[۱] گروه فیزیک دانشگاه سیستان و بلوچستان، بلوار دانشگاه، زاهدان
[۲] گروه شیمی، دانشگاه سیستان و بلوچستان، بلوار دانشگاه، زاهدان

چکیده

در این کار پژوهشی، نانو ذرات هگزافریت استرانسیوم به روش سل-ژل سنتز شده است. ژل‌ها از نیترات فلزی و اسید سیتریک با نسبت مولی Fe/Sr =۱۲/۱ و آمونیاک به عنوان عامل تنظیم کننده pH تهیه شدند. فاز، شناسایی پیوند و ترکیبات، مورفولوژی و اندازه ذرات، خواص مغناطیسی نمونه‌ها با استفاده از پراش اشعه ایکس، طیف سنجی تبدیل فوریه فروسرخ، میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدان و مغناطیس‌سنج نمونه ارتعاشی مورد مطالعه قرار گرفت. اثر دمای بازپخت (دماهای ۷۵۰، ۸۵۰، ۹۵۰ و ۱۰۵۰ درجه سلسیوس) بر ساختار بلوری و خواص مغناطیسی هگزافریت استرانسیوم مورد بررسی قرار گرفت. پراش اشعه ایکس تشکیل فاز خالص هگزافریت استرانسیوم نوع M را در دماهای ۹۵۰ و ۱۰۵۰ درجه سلسیوس نشان می‌دهد. سه حالت ارتعاشی در طیف تبدیل فوریه فروسرخ نمونه‌های بازپخت شده مشاهده شد که نشان دهنده وجود پیوندهای کششی فلز-اکسیژن در هگزافریت بود. میدان وادارندگی (۲۵۰۰-۶۰۰۰ Oe) در شرایط مختلف سنتز به دست آمد. علاوه بر این، ساختار و خواص مغناطیسی پودرهای هگزافریت استرانسیم تولید شده به شدت به شرایط سنتز بستگی دارند.

واژه‌های کلیدی:
هگزافریت استرانسیم، سل_ژل، فریت، نانوذرات، خواص مغناطیسی

Experimental study of some physical properties of strontium hexaferrite nanoparticles Synthesized by sol-gel method

Azarnosh, Esmail[1]; Davarpanah, Abdol Mahmood[1]; Rakhshani Aval, Sajad[2];

[1] Department of Physics, University of Sistan and Baluchestan, Zahedan,
[2] Department of Chemistry, University of Sistan and Baluchestan, Zahedan,

Abstract

In this research work, strontium hexaferite nanoparticles were synthesized by sol-gel method. The gels were prepared from metal nitrate and citric acid with a molar ratio of Fe / Sr = 12.1 and ammonia as a pH regulator. Phase, bond and composition identification, morphology and particle size, magnetic properties of the samples were studied using X-ray diffraction, Fourier transform infrared spectroscopy, field emission scanning electron microscope and vibration sample magnetometer. The effect of annealing temperature (temperatures of 750, 850, 950 and 1050 °C) on the crystal structure and magnetic properties of strontium hexaferite was investigated. X-ray diffraction indicates the formation of pure phase strontium hexaferite type M at temperatures of 950 and 1050 °C. Three vibrational states were observed in the infrared Fourier transform spectrum of the annealed samples, indicating the presence of metal-oxygen tensile bonds in the hexaferrite. The induction field (2500-6000 Oe) was obtained under different synthesis conditions. In addition, the structure and magnetic properties of the strontium hexaferite powders produced strongly depend on the synthesis conditions.

***Keywords**: Strontium hexaferite, sol_gel, ferrite, nanoparticles, magnetic properties*

PACS No. 75

مقدمه

هگزافریت های نوع M فریت هایی با ساختار شش ضلعی با فرمول کلی $MFe_{12}O_{19}$ که در آن M = Ba, Sr, Pb, Ca, La و متعلق به دسته اکسیدهای فرومغناطیسی هستند. از زمان کشف آنها در سال ۱۹۵۰، هگزافریت‌ها به طور گسترده‌ای به عنوان آهنرباهای دائمی استفاده شده‌اند. در حال حاضر، بیشترین استفاده از مواد مغناطیسی سخت در صنعت به عنوان آهنرباهای دائمی، هگزافریت نوع M است و آن به دلیل هزینه تولید پایین، مقاومت در برابر خوردگی بالا، رسانایی الکتریکی پایین، پایداری شیمیایی و ناهمسانگردی مغناطیسی بالا می‌باشد. از جمله کاربردهای آن می‌توان به استفاده از آن در دستگاه‌های الکترونیکی، موتورهای الکتریکی، تولید نیروی ترموالکتریک، حسگرهای گاز، کاتالیزور برای تخریب برخی آلاینده‌ها، مخابرات اشاره کرد. اخیراً در کاربردهای زیست پزشکی مانند سیستم‌های دارورسانی، هایپرترمی در درمان سرطان و عوامل کنتراست برای تشدید مغناطیسی به کار می‌رود [۱].

در این کار، پودر هگزافریت استرانسیوم $SrFe_{12}O_{19}$ به روش سل ژل در مرکز تحقیقات نانوذرات مغناطیسی دانشگاه سیستان و بلوچستان سنتز شده است. هدف از این کار تعیین رابطه بین خواص مغناطیسی و دمای بازپخت، اندازه بلورک ها و برخی خلوص مواد به‌دست آمده می‌باشد.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

روشهای آزمایشی

برای سنتز فریت استرانسیم از نیترات آهن ۹ آبه ($Fe(NO_3)_3.9H_2O$)، نیترات استرانسیم ($Sr(NO_3)_2$) ساخت شرکت مرک آلمان و اسید سیتریک به عنوان مواد اولیه استفاده شده است، نیترات‌های فلزی با نسبت مولی مختلف Fe به Sr جداگانه در حداقل مقدار آب دوبار تقطیر شده حل شدند، مقدار ۰/۲۱ گرم نیترات استرانسیم در آب حل شدند و به ترتیب نسبت‌های مولی آهن به استرانسیم ۱۱، ۱۲ و ۱۳ به ۴/۴۴، ۴/۸۴ و ۵/۲۵ گرم نیترات آهن ۹ آبه که در آب حل شده بودند، به صورت جداگانه اضافه شدند، سپس هم‌زده شدند تا محلول شفافی به دست آمد. اسید سیتریک به آرامی به محلول‌ها اضافه شد و دوباره به مدت ۲۰ دقیقه محلول هم‌زده و سپس محلول آمونیاک کم کم اضافه شد تا pH در عدد ۷ تنظیم شد. محلول‌ها به آرامی روی یک گرمکن در ۸۰ °C با هم زدن مداوم گرم شدند تا آب تبخیر شود و در نهایت ژل‌های قهوه‌ای چسبناک به دست آمدند. ژل‌های بدست آمده در دماهای مختلف بازپخت شد. در مرحله اول Fe به Sr را با نسبت های مولی مختلف بکار برده شدند و ژل‌های بدست آمده در دمای ۹۰۰ °C بازپخت شد در مرحله دوم Fe به Sr با نسبت مولی ۱۲ بکار برده شد و ژل بدست آمده در دماهای ۷۵۰، ۸۵۰، ۹۵۰ و ۱۰۵۰ درجه سلسیوس بازپخت شد سپس نمونه‌های بدست آمده تحت آنالیزهای پراش پرتو ایکس، طیف سنجی تبدیل فوریه فروسرخ، میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدان، مغناطیس سنج نمونه ارتعاشی و طیف‌سنجی مرئی فرابنفش قرار داده شدند که در ادامه نتایج آنالیزها مورد تحلیل و بررسی قرار می‌گیرند.

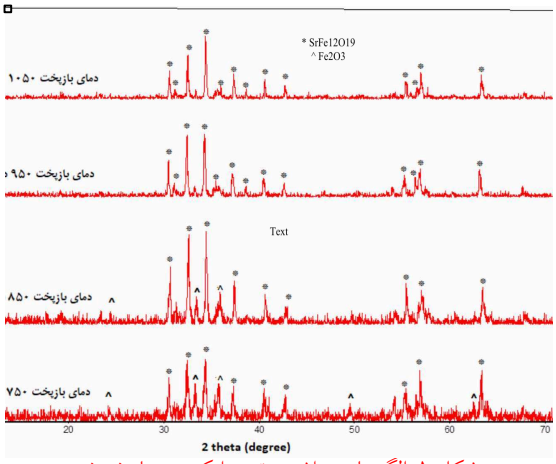
نتایج پراش پرتو ایکس

در شکل ۱ الگوهای پراش پرتوی ایکس چهار نمونه در دماهای بازپخت متفاوت در نسبت مولی ۱۲ مشاهده می‌شود، قله‌ها در هر چهار الگوی پراش پرتوی ایکس در مقادیر 2θ به صورت، ۳۲/۳۵، ۳۴/۱۸، ۳۷/۱۲، ۴۰/۳۸ ، ۵۶/۸۵ و ۶۳/۱۳ درجه نسبت داده شده به صفحات میلر (۱۰۷) ، (۱۱۴) ، (۲۰۳) ، (۲۰۵) ، (۲۰۱۱) و (۲۲۰) که بازتاب الگوی استاندارد برای بلورهای شش ضلعی نوع M، $SrFe_{12}O_{19}$ است. بعلاوه، با افزایش دمای بازپخت (از ۷۵۰ به ۱۰۵۰ درجه سلسیوس)، شدت قله‌ها، به ویژه در 2θ =۳۴/۱۸، افزایش پیدا کرده است که نشان از بهبود در درجه بلورینگی پودرهای بازپخت شده می‌دهد. از طرف دیگر، بازپخت در دمای ۷۵۰ °C برای بدست آوردن ساختار تک فاز بلور شش ضلعی کافی نبود، وجود قله‌هایی در مقادیر 2θ به صورت ۳۴/۲۱، ۳۵/۶۱، ۵۴/۰۱، ۴۹/۳۴ و ۲۴/۰۵ منعکس کننده حضور فاز اکسید آهن است. با افزایش دمای بازپخت وجود فاز Fe_2O_3 کمتر می‌شود و در دماهای ۹۵۰ و ۱۰۵۰ درجه سلسیوس از بین می‌رود و تک فاز هگزافریت استرانسیم تشکیل می‌شود .

اندازه متوسط بلورک‌ها نیز با توجه به جدول ۱ با افزایش دمای بازپخت افزایش می‌یابد و از ۳۵/۲ نانومتر در دمای بازپخت ۷۵۰ °C به ۵۳ نانومتر در دمای بازپخت ۱۰۵۰ °C می‌رسد .

جدول۱ میانگین اندازه بلورک‌ها و دمای بازپخت متفاوت در نسبت مولی ۱۲

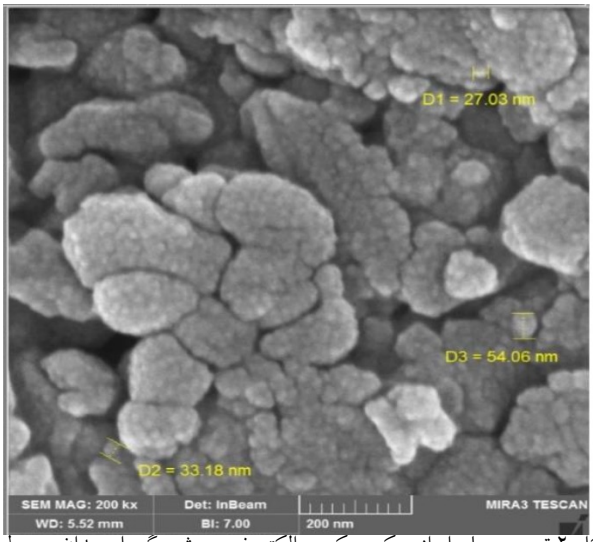
میانگین اندازه بلورک‌ها (نانومتر)	دمای بازپخت °C
۳۵/۲	۷۵۰
۴۲/۲	۸۵۰
۴۲/۴	۹۵۰
۵۳/۰	۱۰۵۰



شکل ۱. الگوهای پراش پرتوی ایکس چهار نمونه در دماهای بازپخت متفاوت با نسبت مولی ۱۲

نتایج میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدان

شکل ۲ تصویر حاصل از میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدان مربوط به نمونه بازپخت شده در دمای ۹۵۰ °C با نسبت مولی ۱۲ را نشان می‌دهد، که در مقیاس ۲۰۰ نانومتر به ترتیب با بزرگنمایی ۱۰ هزار برابر قابل مشاهده است. این تصویر شکل ذرات را تقریبا نزدیک به شش ضلعی برای ذرات فریت استرانسیم نشان می‌دهد.
با استفاده از تصویر بدست آمده از میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدان مربوط به نمونه با نسبت مولی ۱۲، توزیع اندازه ذرات برای ۱۲۰ ذره محاسبه شد. برای انجام این کار از نرم افزارهای ایمج جی و اوریجین استفاده شد. نتایج نشان از ذراتی با فراوانی بیش‌تر در محدوده بین ۳۰–۲۵ نانومتر دارد. کمترین اندازه بین ذرات ۱۲/۶۱ نانومتر و بیش‌ترین اندازه ۴۸/۳۴ نانومتر است، حد وسط توزیع اندازه ذرات نیز ۲۹/۷۴ نانومتر است

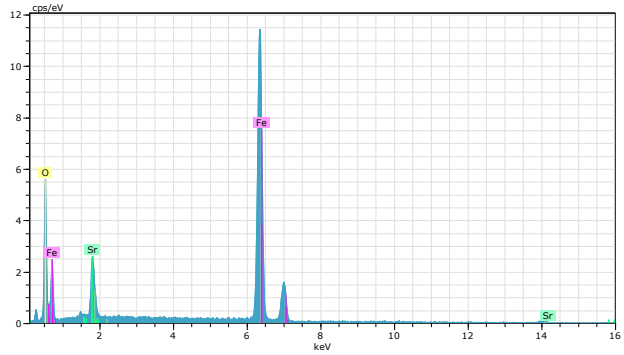


شکل ۲ تصویر حاصل از میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدان مربوط به نمونه با نسبت مولی ۱۲

نتایج طیف سنجی پراش انرژی پرتو ایکس

شکل ۳ طیف سنجی پراش انرژی پرتو ایکس ترکیبات پودر هگزافریت استرانسیم نوع M را نشان می‌دهد. همانطور که در شکل دیده می‌شود، فقط عناصر تشکیل دهنده هگزافریت استرانسیوم (Sr، Fe، O) شناسایی شده‌اند

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل ۳ آنالیز پراش انرژی پرتو ایکس نمونه
بازپخت شده در ۹۵۰ °C با نسبت مولی ۱۲

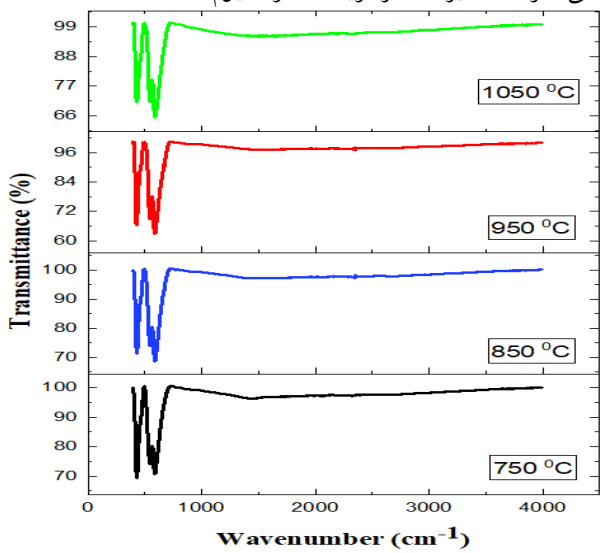
نتایج طیف سنجی پراش انرژی پرتو ایکس حاصل از نمونه سنتز شده با مقادیر نظری [۲] همانطور که در جدول ۲ آمده است، مطابقت خوبی دارد .

جدول ۲ مقایسه نتایج طیف سنجی پراش انرژی پرتو ایکس حاصل از نمونه سنتز شده با مقادیر نظری

عنصر	درصد وزنی نمونه آزمایشگاهی (٪)	درصد وزنی نظری (٪)	درصد خطای وزنی نمونه آزمایشگاهی (٪)
Fe	۶۱/۵۳	۶۳/۱۰	۱/۵۷
O	۳۱/۳۲	۲۸/۶۳	۲/۵۹
Sr	۷/۱۶	۸/۲۵	۱/۰۹

نتایج طیف تبدیل فوریه فروسرخ

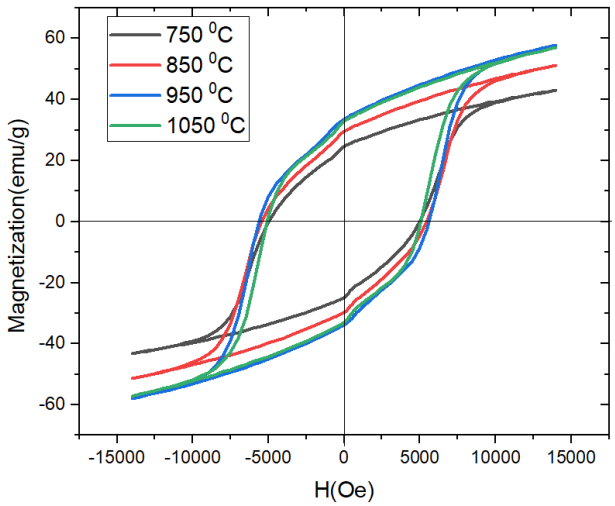
در شکل ۴ طیف تبدیل فوریه فروسرخ مربوط به چهار نمونه با نسبت مولی یکسان ۱۲ که در دماهای ۷۵۰، ۸۵۰، ۹۵۰ و ۱۰۵۰ درجه سلسیوس بازپخت شده‌اند، نمایش داده شده است. برای هر چهار نمونه قله‌های تقریبا مشابهی دیده می‌شود، به عنوان مثال در نمونه بازپخت شده در دمای ۹۵۰ °C قله‌هایی در ۴۲۶/۲۶ cm^{-1}، ۵۴۴/۳۶ cm^{-1} و ۵۸۶/۹۵ cm^{-1} ظاهر می‌شود که ناشی از ارتعاشات کششی فلز – اکسیژن هگزافریت استرانسیوم است



شکل ۴ طیف تبدیل فوریه فروسرخ نمونه‌ها در دماهای بازپخت متفاوت

نتایج مغناطیس‌سنج نمونه ارتعاشی نانوذرات هگزافریت استرانسیم

شکل ۵ منحنی پسماند چهار نمونه مورد مطالعه را نشان می‌دهد که در دماهای ۷۵۰، ۸۵۰، ۹۵۰ و ۱۰۵۰ درجه سیلیسیوس بازپخت شده‌اند. میدان مغناطیسی خارجی اعمال شده (H) تا بیشینه پانزده هزار اورستد بوده است. با توجه به شکل ۴ (استفاده از نرم‌افزار اوریجین) و نتایج مقادیر میدان وادارندگی (H_c)، مغناطش باقیمانده (M_r) و مغناطش اشباع (M_s) برای چهار نمونه هگزافریت استرانسیم برای دماهای متفاوت بازپخت، در جدول ۳ آورده شده است.



شکل ۵ منحنی‌های پسماند چهار نمونه در دماهای بازپخت متفاوت

طبق نتایج حاصل از آنالیز مغناطیس‌سنجی نمونه ارتعاشی در این تحقیق، مغناطش اشباع برای سه نمونه با دماهای بازپخت ۷۵۰، ۸۵۰ و ۹۵۰ درجه سیلیسیوس از دمای پایین‌تر به دمای بالاتر به دلیل حذف فاز Fe_2O_3 در طی افزایش دمای بازپخت افزایش می‌یابد [۳]، وقتی دمای بازپخت به ۱۰۵۰ °C افزایش پیدا می‌کند، مغناطش اشباع کاهش می‌یابد. مغناطش باقیمانده مربوط به دمای بازپخت ۹۵۰ °C بیشتر از سه نمونه دیگر است، مغناطش باقیمانده نیز با افزایش دما از ۷۵۰ به ۸۵۰ و سپس ۹۵۰ درجه سیلیسیوس افزایش پیدا می‌کند و در دمای ۱۰۵۰ °C کاهش می‌یابد کم‌ترین میدان وادارندگی (H_c) در دماهای بازپخت ۷۵۰ و ۱۰۵۰ درجه سلسیوس و بیش‌ترین مقادیر آن در دماهای بازپخت ۸۵۰ و ۹۵۰ درجه سلسیوس به‌دست آمده است. با افزایش دمای بازپخت میدان وادارنگی افزایش می‌یابد، سپس در دمای بازپخت ۱۰۵۰ °C کاهش می یابد. این می‌تواند ناشی از انتقال از ساختار تک حوزه مغناطیسی به ساختار چند حوزه ای مغناطیسی در طول رشد اندازه ذرات باشد [۳]. که با نتایج گارسیا و همکاران [۴] و روحانی و همکاران [۳] در تهیه نانوذرات هگزافریت استرانسیوم به روش سل-ژل همخوانی دارد. در نتیجه می‌توان خواص مغناطیسی را با دماهای بازپخت تنظیم نمود .

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

جدول ۳ نتایج مغناطیس‌سنجی چهار نمونه بازپخت شده در دماهای متفاوت

دمای بازپخت °C	میدان وادارندگی (H_c) (Oe)	مغناطش باقیمانده (M_r) (emu/g)	مغناطش اشباع (M_s) (emu/g)
۷۵۰	۵۰۰۰	۲۵/۱۳	۴۳/۰۹
۸۵۰	۵۵۰۰	۳۰/۰۰	۵۱/۲۰
۹۵۰	۵۵۰۰	۳۴/۱۳	۵۷/۸۹
۱۰۵۰	۵۰۰۰	۳۳/۲۸	۵۷/۰۵

نتیجه گیری

در این مقاله تأثیر دمای بازپخت بر خواص ساختاری و مغناطیسی نانوذرات $SrFe_{12}O_{19}$ سنتز شده به روش سل‌ـژل مورد بررسی قرار گرفته است. نتیجه گیری عمده از تجزیه و تحلیل پراش اشعه ایکس، طیف سنجی تبدیل فوریه مادون قرمز، میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدان، مغناطیس سنج نمونه ارتعاشی و طیف سنجی مرئی فرابنفش مورد مطالعه قرار گرفت که به شرح زیر خلاصه می‌شود :

- طیف پراش اشعه ایکس حاصل از نانوذرات $SrFe_{12}O_{19}$ پس از بازپخت شدن در دمای ۷۵۰ °C وجود دو فاز $SrFe_{12}O_{19}$ و Fe_2O_3 را که دارای ساختارهای شش گوشه هستند را تایید می‌کند. با افزایش دما فاز Fe_2O_3 کم کم ناپدید و در دمای ۹۵۰ و ۱۰۵۰ درجه سلسیوس تک فاز هگزافریت استرانسیم داشتیم.
- تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدان گرفته شده از نانوذرات $SrFe_{12}O_{19}$ بعد از بازپخت نزدیکی اندازه بلورک‌ها را با مقداری که از فرمول شرر به‌دست آوردیم را تایید می‌کند
- در طیف تبدیل فوریه فرو سرخ همه نمونه های بازپخت شده، سه باند فرکانسی در محدوده ۴۴۵–۴۳۵، ۵۶۰–۵۵۰ و ۶۱۰–۵۹۰ ظاهر می‌شود که وجود ارتعاشات کششی اکسیژن‌ـفلز هگزافریت استرانسیوم را تأیید می‌کند
- نتایج طیف سنجی پراش انرژی پرتو ایکس وجود عناصر تشکیل دهنده هگزافریت استرانسیم را تایید می‌کند.
- نتایج مغناطیس سنجی نانوذرات نشان می‌دهد که با افزایش دمای بازپخت از ۷۵۰ تا ۹۵۰ درجه سلسیوس مغناطش اشباع، مغناطش باقی مانده و میدان وادارندگی افزایش و در ۱۰۵۰ کاهش پیدا می‌کنند.

سپاسگزاری

از همکاری حوزه معاونت پژوهشی دانشگاه سیستان و بلوچستان صمیمانه تشکر می‌کنیم.

مرجع‌ها

[1]. M. A. Urbano-Peña, S. A. Palomares - Sánchez· I. Betancourt, T. J. Pérez - Juache, F. Ruiz, Effect of temperature on the magnetic properties of strontium hexaferrite synthesized by the Pechini method, *Applied Physics A* (2019) **125**:711 https://doi.org/10.1007/s00339-019-3004-z

[2]. B. Abraime, M. Ait Tamerd, A. Mahmoud, F. Boschini, A. Benyoussef, M. Hamedoun, Y. Xiao, A. el Kenz, O. Mounkachi, Experimental and theoretical investigation of $SrFe_{12}O_{19}$ nanopowder for permanent magnet application, *Ceramics International*, Vol **43**, (2017) Issue (17), pp 15999–16006.

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

[4]. L. A. García-Cerda, O. S. Rodríguez-Fernández, P. J. Reséndiz-Hernández, Study of SrFe12O19 synthesized by the sol-gel method, *Journal of Alloys and Compounds,* Vol **369**, Issue1–2 (2004) pp 182–184.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی اثر فشار گاز آرگون روی مورفولوژی سطحی و ثابت دی‌الکتریک شبکه لایه های نازک اکسید روی آلائیده با آلومینیوم

شیراوند، مهدیه [1]؛ قبادی، نادر [2]

[1] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ملایر، ملایر

چکیده

در این مقاله لایه‌های نازک اکسید روی آلائیده با آلومینیوم (AZO) بر زیرلایه شیشه‌ای به روش کندوپاش مغناطیسی جریان مستقیم لایه‌نشانی شدند. اثر فشار گاز آرگون بر مورفولوژی سطح لایه‌ها و ویژگی‌های اپتیکی مورد ارزیابی قرار گرفت. مورفولوژی سطحی لایه‌ها نشان می‌دهد با افزایش فشار گاز آرگون، اندازه تقریبی میانگین نانو ذرات افزایش یافته‌اند. نتایج $\frac{N}{m^*}$ بیشترین مقدار را برای لایه نازک AZO با فشار $3 \times 10^{-2}\ mbar$ دارد که نشان دهنده کاهش حالات جایگزیده و انتقال درصد حامل‌های بار جایگزیده به درصد حامل‌های بار آزاد می‌باشد، همچنین با افزایش فشار گاز آرگون ثابت دی‌الکتریک شبکه افزایش یافت.

واژه‌های کلیدی: *لایه‌های نازک اکسید روی آلائیده با آلومینیوم، کندوپاش مغناطیسی جریان مستقیم، ثابت دی‌الکتریک شبکه*

The investigation of effect of Ar gas pressure on surface morphology and, the lattice dielectric constant of zinc oxide thin films doped with aluminum

Mahdiyeh, Shiravand [1]; Ghobadi, Nader[2]

[1]*Department of Physics, Faculty of Science, Malayer university, Malayer*

ABSTRACT

In this work, Aluminum doped Zinc oxide thin films (AZO) were deposited on a glass substrate by the direct current magnetron sputtering method. The influence of Ar gas pressure on the surface morphology and optical characteristics were evaluated. The surface morphology indicates the mean approximate size of nanoparticles is increased with enhancing of Ar gas pressure. The results of $\frac{N}{m^*}$ has the highest value for a AZO thin film with a pressure of $3 \times 10^{-2}\ mbar$, which indicates the reduction of localized states and transfer of the percentage of localized charge carriers to the percentage of free charge carriers also, the values of ε_L with enhancing of Ar gas pressure is increased .

Keywords: *AZO thin film, direct current magnetron sputtering method, the lattice dielectric constant*

مقدمه

امروزه نانو مواد نقش مهمی در شاخه های مختلف علوم مانند مهندسی و صنعت ایفا می‌کنند، بنابراین برای بررسی بسیار جالب هستند. زمانیکه لایه‌های نازک اکسید روی با عناصر گروه سوم جدول تناوبی آلائیده می‌شوند دارای ماهیت رسانایی شده و به طور وسیع در روکش ها، سنسورهای گازی، دیود ها، سلول‌های خورشیدی و نمایشگرها استفاده می‌شوند. در میان این مواد رسانای شفاف اکسیدی، نیم‌رساناهای لایه نازک آلومینیوم آلائیده شده بر اکسید روی به علت ویژگی‌های جالبشان مانند مقاومت ویژه پایین، عبور اپتیکی بالا در ناحیه مرئی، هزینه کم مواد، ماهیت غیرسمی، رسانایی الکتریکی بالا، گذار مستقیم و سازگاری با فیزیولوژی بدن انسان برای ساخت برخی آنزیم‌ها مورد توجه واقع شده‌اند [1-7]. به منظور به دست آوردن لایه‌های نازک آلومینیوم آلائیده شده بر اکسید روی، روش‌های لایه‌نشانی متنوعی مانند کندوپاش مغناطیسی جریان مستقیم، رسوب دهی حمام شیمیای، سل ژل، و ...وجود دارند. در کار حاضر، لایه‌های نازک AZO با

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تغییر فشار گاز آرگون به روش کندوپاش مغناطیسی جریان مستقیم تهیه شدند، این روش به علت انعطاف پذیری و توانایی برای لایه نشانی لایه‌ها تحت خلا، کنترل بر ترکیب لایه‌ها، استوکیومتری و چسبندگی خوب انتخاب شده است. دراین مقاله مورفولوژی سطحی و اپتیکی لایه‌های نازک AZO با تغییر فشار گاز آرگون مورد آنالیز قرار گرفته است [10-8].

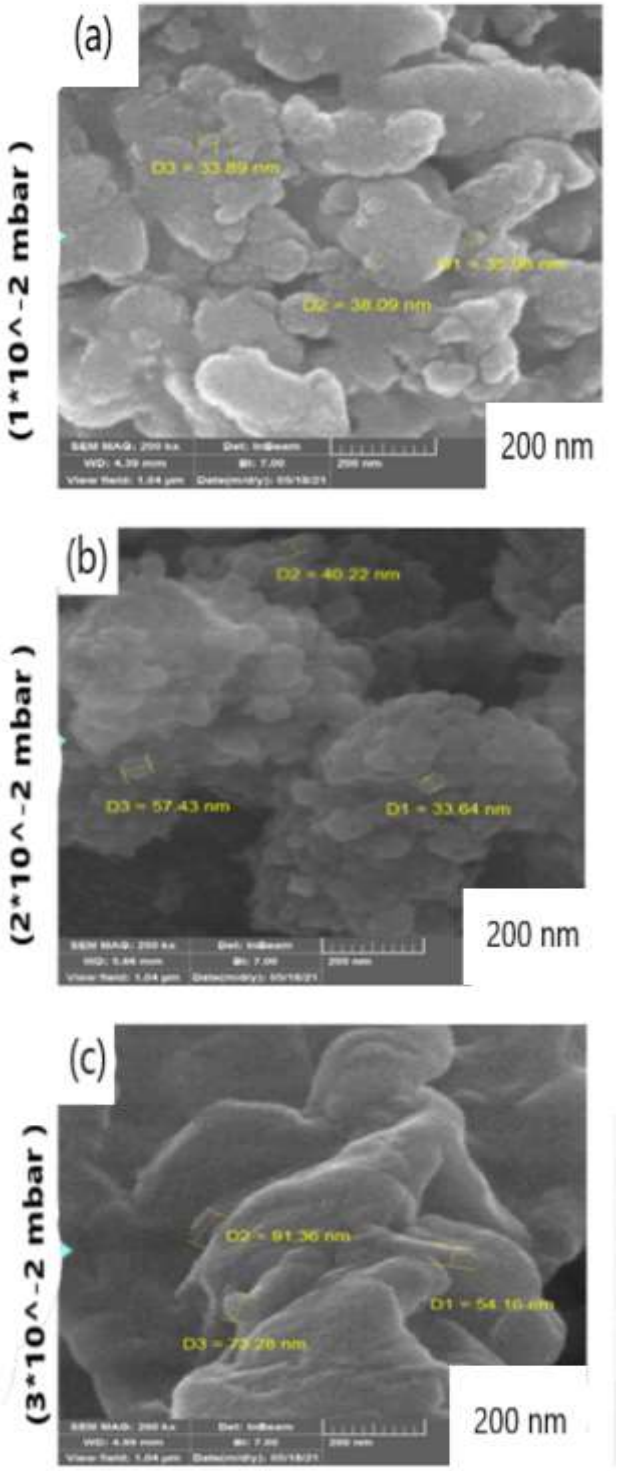
روش آزمایشگاهی

لایه‌های نازک آلومینیوم آلائیده شده بر اکسید روی به روش کندوپاش مغناطیسی جریان مستقیم تهیه شدند. یک دیسک AZO باخلوص 99 درصد با قطر 100 نانومتر به عنوان کاتد استفاده شد. همه لایه‌های نازک AZO با شرایط یکسانی شامل جریان ورودی 175 میلی‌آمپر و ولتاژ ورودی 300 ولت لایه‌نشانی شدند. ابتدا زیرلایه‌های شیشه ای برای از بین بردن ذرات چسبیده به سطحشان درحمام اولتراسونیک به وسیله استون واتانوال به مدت 20 دقیقه تمیز شدند سپس در آب دیونیزه شسته شده و درهوای داغ و فشار بالا خشک شدند. زیرلایه ها در محفظه قرارگرفتند و محفظه به وسیله پمپ‌های روتاری و توربو تا فشار $2.8 \times 10^{-5}\ mbar$ خلأ شد سپس فشار محفظه با گاز آرگون با خلوص 99 درصد افزایش یافت. در کار حاضر لایه‌های نازک AZO در فشارهای $1 \times 10^{-2}\ mbar$، $2 \times 10^{-2}\ mbar$ و $3 \times 10^{-2}\ mbar$ لایه‌نشانی شدند.

نتایج ساختاری

آنالیز FESEM

مورفولوژی سطح لایه‌ها یک نقش مهم در بررسی تغییر ویژگی‌های مختلف لایه‌های نازک اکسید فلزی بازی می‌کند. در این مقاله آنالیز FESEM برای بررسی مورفولوژی سطحی و رشد ذرات و تخمین اندازه نانو ذرات بر سطح لایه‌های اکسید روی آلائیده با آلومینیوم با تغییر فشار گاز آرگون استفاده شده است. شکل 1 تصاویر FESEM با بزرگنمایی 200 نانومتر را نشان می‌دهد که با افزایش فشار گاز آرگون از $1 \times 10^{-2}\ mbar$ به $3 \times 10^{-2}\ mbar$ ، اندازه تقریبی میانگین نانو ذرات از 35.98 نانومتر به 72.93 نانومتر افزایش یافته است [11] .



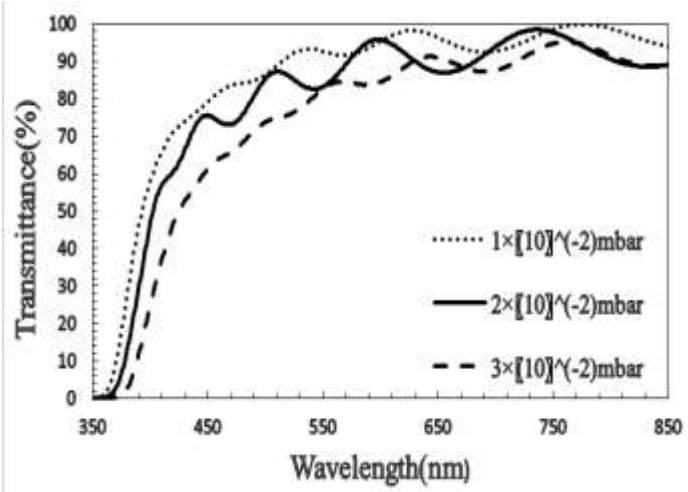
شکل 1: تصاویر FESEM برای لایه‌های نازک AZO با تغییر فشار گاز آرگون از $1 \times 10^{-2}\ mbar$ به $3 \times 10^{-2}\ mbar$

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

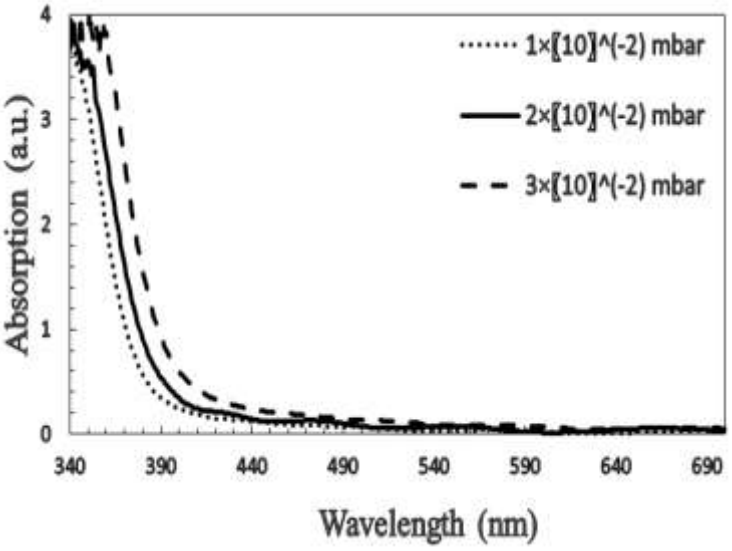
نتایج اپتیکی

الف. بررسی طیف عبور و جذب اپتیکی لایه‌ها

عبور اپتیکی لایه‌ها یک نقش اساسی را در مشخصه یابی لایه‌های نازک TCO بازی می‌کند. در این مقاله طیف عبور اپتیکی به وسیله طیف سنج فرابنفش- مرئی در رنج طول موجی 190 تا 1100 نانومتر با افزایش فشار گاز آرگون مورد بررسی قرار گرفت [12,13]. شکل 2 نشان می‌دهد طیف میانگین عبور اپتیکی لایه‌های نازک AZO با افزایش فشار گاز آرگون به علت افزایش ضخامت لایه‌ها از 87.5 درصد به 73 درصد کاهش می‌یابند، بنابراین لایه نازک AZO با کمترین فشار گاز آرگون بیشترین عبور اپتیکی را نشان می‌دهد، نتایج در جدول 1 ذکر شده است. شکل 3 طیف جذب برای فشارهای گازی آرگون مختلف را نشان می‌دهد، این شکل تشریح می‌کند که جذب با افزایش طول موج با لبه جذب تیز کاهش می‌یابد.



شکل 2: طیف عبور اپتیکی لایه‌های نازک AZO با تغییر فشار گاز آرگون از $1 \times 10^{-2}\ mbar$ به $3 \times 10^{-2}\ mbar$



شکل 3: طیف جذب لایه‌های نازک AZO با تغییر فشار گاز آرگون از $1 \times 10^{-2}\ mbar$ به $3 \times 10^{-2}\ mbar$

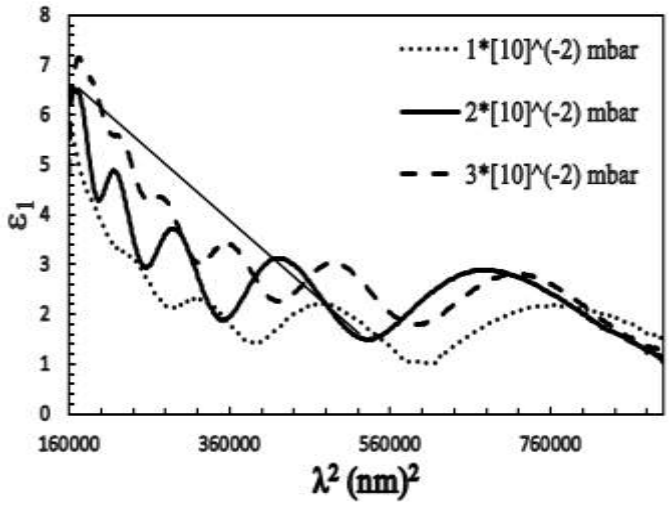
ب. محاسبه ثابت دی‌الکتریک شبکه

معادله (1) رابطه بین ثابت دی‌الکتریک شبکه (ε_L) و ضریب شکست n را نشان می‌دهد:

$$\varepsilon_1 = n^2 - k^2 = \varepsilon_L - \frac{e^2 N}{4\pi^2 c^2 \varepsilon_0 m^*}\lambda^2 \qquad (1)$$

که ε_1، λ، N، ε_0، m^* و c بخش حقیقی ثابت دی‌الکتریک، طول موج فوتون فرودی، حامل بار آزاد، گذردهی خلأ، جرم موثر حامل بار و سرعت نور می‌باشند، که با رسم ε_1 بر حسب λ^2 و محاسبه بخش خطی می‌توان N/m^* و ثابت دی‌الکتریک شبکه را محاسبه کرد. نتایج شکل 4 بیشترین مقدار $\frac{N}{m^*}$ را برای لایه نازک AZO با فشار $3 \times 10^{-2}\ mbar$ نشان می‌دهد که نشان دهنده کاهش حالات جایگزیده و انتقال درصد حامل‌های بار جایگزیده به درصد حامل‌های بار آزاد می‌باشد، همچنین با افزایش فشار گاز آرگون ثابت دی‌الکتریک شبکه افزایش یافت. نتایج در جدول 1 ذکر شده است[14, 15] .

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل 4: تغییرات ε_1 بر حسب λ^2 برای لایه‌های نازک AZO با تغییر فشار گاز آرگون از $1 \times 10^{-2}\ mbar$ به $3 \times 10^{-2}\ mbar$

جدول 1: مقادیر اپتیکی لایه‌های نازک AZO با تغییر فشار گاز آرگون از $1 \times 10^{-2}\ mbar$ به $3 \times 10^{-2}\ mbar$

Ar gas pressure (10^{-2} mbar)	T (%)	ε_1	$\frac{N}{m^*} * (10^{40} m^{-3} kg^{-1})$	ε_L
$1 \times 10^{-2}\ mbar$	87.5	2.5984	1.227	5.5366
$2 \times 10^{-2}\ mbar$	79	3.3891	1.104	6.6226
$3 \times 10^{-2}\ mbar$	73	4.0038	1.229	8.5195

نتیجه‌گیری

- با افزایش فشار گاز آرگون درصد عبور اپتیکی میانگین به علت افزایش ضخامت لایه‌ها کاهش می‌یابد.
- مورفولوژی سطحی لایه‌ها نشان می‌دهد با افزایش فشار گاز آرگون اندازه تقریبی میانگین نانوذرات افزایش می یابد.
- افزایش فشار گاز آرگون باعث انتقال درصد حامل‌های بارجایگزیده به درصد حاملهای بار آزاد می‌شود و با افزایش فشار گاز آرگون ثابت دی‌الکتریک شبکه افزایش می‌یابد.

مرجع‌ها

[1] Y. Xia, P.Wang, G. He, M. Zhang, Sh. Shi, Y. Liu, Z. Sun; Surface &Coatings Technology **320,** (2017) 34-38.
[2] Sh. F. Tseng; Applied Surface Science **448,** (2018) 163-167.
[3] D. K. Kim, H. B. Kim; Journal of Alloys and Compounds **509,** (2011) 421-425.
[4] T. K. Subramanyam, P. Goutham, S. P. Kumar, S. R. Yadhuraj, K. S. Geetha; Materials Today **5,** (2018)10851-10859.
[5] S. Rahmane, M. A. Djouadi, M. S. Aida, N. Barreau, B. Abdallah, N. H. Zoubir; Thin Solid Films **519,** (2010)5-10.
[6] M.Wang, Q. Liu, G. Dong, Y. He, X. Diao; Electrochimica Acta **258,** (2017) 1336-1347.
[7]N. E. Duygulu, A. O. Kodolbas, A. Ekerim; Journal of Crystal Growth **394,** (2014)116-125.
[8] B. Sarma, D. Barman, B. K. Sarma; Applied Surface Science **479,** (2019)786-795.
[9] L. Wen, B. B. Sahu, H. R. Kim, J. G. Han; Applied Surface Science **473,** (2019) 649-656.
[10]M. R. Islam, M. Rahman, S. F. U. Farhad, J. Podder; Surfaces and Interfaces **16,** (2019)120-126.
[11] K. D. A. Kumar, S.Valanarasu, S. R. Rosario, V.Ganesh, M. Shkir, C. J. Sreelatha, S. AlFaify; Solid State Sciences **78,** (2018) 58-68.
[12] K. Samanta, P. B. hattacharya, R. S. Katiyar; J. Appl.Phys **108**, (2010) 3501-3504.
[13] A. Sharmin, S. Tabassum, M. S. Bashar, Z. H. Mahmood; Journal of Theoretical and Applied Physics **13,** (2019)123-132.
[14] L. Dejam, Sh. Solaymani, A. Achour, S. Stach, S. Talu, N. Beryani Nezafat, V. Dalouji, A. A. Shokri, A. Ghaderi; Chemical Physics Letters **719,** (2019)78-90.
[15] A. Q. Abdullah; Chemistry and Materials Reserch **3,** (2013)56-63.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

ساخت رنگدانه‌های سرامیکی آبی کبالت پیروکسن و کبالت اکرمانیت به روش حالت جامد و بررسی برخی خواص اپتیکی

رفیق، ریژنه روستم[۱]؛ خواجه امینیان، محسن [۱]؛ مطهری، حمید [۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه یزد، صفاییه ، یزد

چکیده

در این پژوهش خواص فیزیکی دو نمونه رنگدانه سیلیکات کلسیوم کبالت بررسی شده‌است. این رنگدانه‌ها شامل کبالت پیروکسن ($CaCoSi_2O_6$) و کبالت اکرمانیت ($Ca_2CoSi_2O_7$) هستند که با روش حالت جامد ساخته و مشخصه‌یابی شده‌اند. رنگدانه کبالت پیروکسن دارای رنگ صورتی- بنفش است و رنگدانه کبالت اکرمانیت در پیروکسن‌های غنی از کلسیم ایجاد می‌شود که این رنگدانه دارای رنگ آبی است. پخت نمونه‌ها در دمای ۱۱۵۰ درجه سانتی‌گراد انجام شده‌است. نمونه رنگدانه‌های تولید شده با استفاده از آنالیز پراش پرتو X و میکروسکوپ الکترون روبشی SEM و آزمون رنگ‌سنجی و طیف بازتاب UV-Vis ارزیابی شده‌اند. با روش آسیابکاری، جوهر برای چاپ بر روی کاشی سرامیکی بدست آمد و پس از چاپ بر روی کاشی سرامیکی، در دمای ۱۱۲۵ درجه سانتی‌گراد پخت شد و پارامترهای رنگی نمونه با آزمون رنگ‌سنجی اندازه‌گیری شده‌اند. آزمون رنگ‌سنجی نشان دهنده آبی بودن نمونه‌ها چاپ شده بر روی کاشی است.

واژه‌های کلیدی: *رنگدانه، آبی، سرامیک، کبالت پیروکسن، کبالت اکرمانیت، خواص اپتیکی*

Synthesis of blue ceramic Co-pyroxene ($CaCoSi_2O_6$) and Co-åkermanite ($Ca_2CoSi_2O_7$) pigments by solid state method and optical properties characterization

Rafiq, Rezhna Rostam [1]; Khajeh Aminian, Mohsen [1]; Motahari, Hamid [1]

[1] *Department of Physics, Yazd University, Yazd*

Abstract

In this research, the physical properties of two samples of calcium cobalt silicate pigment have been investigated. These pigments include cobalt pyroxene ($CaCoSi_2O_6$) and cobalt åkermanite ($Ca_2CoSi_2O_7$) which were synthesized and characterized by solid state method. Cobalt pyroxene pigment has a pink-purple color and cobalt åkermanite pigment is formed in calcium-rich pyroxene, which is blue. The samples were baked at a temperature of 1150 °C. The produced pigment samples were characterized using X-ray diffraction analysis and scanning electron microscopy SEM and colorimetric test and UV-Vis optical reflectance spectrum. By milling method, the ink was obtained for printing on ceramic tiles and after printing on ceramic tiles, it was baked at 1125 °C and the color parameters of the sample were measured by colorimetric test. The colorimetric test indicates that the samples printed on the tile are blue.

***Keywords**: pigment, blue, ceramic, Co-pyroxene, Co-åkermanite, Optical properties*

PACS No. 61, 78

مقدمه

رنگدانه‌های سرامیکی مقاومت شیمیایی و پایداری زیادی دارند [۱, ۲] و رنگدانه‌های سرامیکی مبتنی بر کبالت برای لعاب‌های رنگی آبی در کاشی سرامیکی کف یا دیوار استفاده می‌شود. روش حالت جامد روشی ساده‌تر برای کاربردهای صنعتی آنهاست. این روش عمدتاً شامل مخلوط / آسیاب کردن مواد اولیه و کلسینه‌کردن در دمای بالا می‌باشد [۱-۳]. اگر اتم کبالت در ساختار بلوری چهار وجهی باشد مانند رنگدانه کبالت آبی، اسپینل $CoAl_2O_4$، رنگ آبی تیره بدست می‌آید. اگر تعداد وجه ساختار بیشتر، شش یا هشت باشد، به رنگ صورتی تغییر می‌کند مانند $CaCoSi_2O_6$،Co_2SiO_4

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

یا $Co_3Al_2Si_3O_{12}$. نانورنگدانه آبی آلومینات کبالت به دلیل خواص نوری مؤثر آن به طور گسترده‌ای در صنایع سرامیک، شیشه‌ای و ... مورد استفاده قرار می‌گیرد [٤].

در دو نمونه رنگدانه سیلیکات کلسیم-کبالت، کبالت موقعیت‌های ساختاری متفاوتی را اشغال می‌کند. در ساختار کبالت اکرمانیت $Ca_2CoSi_2O_7$، کاتیون‌های کبالت در ساختار چهار وجهی به کمک اتم‌های اکسیژن قرار می‌گیرند. در ساختار کبالت پیروکسن $CaCoSi_2O_6$، کبالت در ساختار هشت وجهی قرار می‌گیرد [٥]. پیروکسن یک دسته از مواد دو سیلیکاتی با فرمول شیمیایی $M_2M_1T_2O_6$ است، که در آن M_2 در ساختار شش وجهی، M_1 هشت وجهی و T چهار وجهی تعریف شده‌است. در کبالت پیروکسن، وجود کبالت باعث رنگ صورتی آن می‌شود که در نتیجه جذب نور ناشی از هشت وجهی M_1 است. در رنگدانه کبالت پیروکسن به دلیل یون‌های موجود در محل‌های M_1 و M_2 رنگ صورتی-بنفش دارد. کبالت در فرایند تولید سرامیک در لعاب حل می‌شود و یک هماهنگی چهار وجهی در مذاب ایجاد می‌کند. در نتیجه هماهنگی چهار وجهی کبالت، رنگ آبی بسیار شدیدی به آن می‌دهد. کبالت در کبالت اکرمانیت رنگ آبی ایجاد می‌کند [٤].

یکی از پر کاربردترین روش‌ها برای تهیه جوهر سرامیکی، روش آسیاب است. آسیاب گلوله‌ای با انرژی بالا برای شکستن ذرات پودر استفاده می‌شود. برای ساختن جوهر سرامیکی رنگدانه، حلال مناسب و ماده پخش کننده به نسبت معینی در محفظه ضد سایش ریخته می‌شود. هنگامی که محفظه در داخل آسیاب ماهواره‌ای قرار می‌گیرد، ضربه گلوله انرژی زیادی را به ذرات وارد می‌کند. با گذشت زمان، ذرات شکسته شده به ذرات معلق در جوهر تبدیل می‌شوند [٦].

در این مقاله دو رنگدانه آبی با ترکیب سیلیکات کلسیم-کبالت به روش حالت جامد ساخته می‌شود. سپس رنگدانه به جوهر تبدیل شده و روی کاشی و سرامیک چاپ می‌شود.

روش تجربی

مواد استفاده شده برای نمونه‌های کبالت پیروکسن به نام CP و کبالت اکرمانیت CA در جدول۱ آمده است و در ادامه روش ساخت رنگدانه توضیح داده خواهد شد. در این مقاله رنگدانه‌ها با استفاده از روش حالت جامد ساخته می‌شود.

در ابتدا مقداری $CoCl_2*6H_2O$ به آب مقطر اضافه شد و روی همزن مغناطیسی قرار گرفت تا حل شود. سپس SiO_2 و $CaCO_3$ به آن اضافه شد. بعد از آنکه مواد با یکدیگر مخلوط شدند محلول خشک می‌شود. پودر بدست آمده در دمای ۱۱۵۰ درجه سانتی‌گراد ۲۰ ساعت پخت شد تا رنگدانه صورتی- بنفش تولید شد. این نمونه CP نام گرفت. همچنین نمونه دوم مانند فوق با این تفاوت که مقدار مواد اولیه متفاوت است، در جدول۱ آمده است، پودر بدست آمده در دمای ۱۱۵۰ درجه سانتی‌گراد ۳۰ ساعت پخت شد و رنگدانه آبی تولید شد. این نمونه CA نام گرفت. در ادامه رنگدانه‌های ساخته شده با حلال مناسب به مدت ۱ ساعت درون آسیاب با٤٥٠ دور بر دقیقه همگن شده‌اند و جوهرها تهیه شده‌اند. سپس با استفاده از دستگاه چاپ تخت بر روی کاشی چاپ شده‌اند و در کوره خط تولید به مدت ٥٠ دقیقه با دمای ۱۱۲٥ درجه سانتی‌گراد پخت شده‌اند. خواص فیزیکی شامل ریزساختار و خواص بلوری آنها بررسی شد. پارامترهای رنگی رنگدانه‌ها و کاشی چاپ شده با استفاده از آزمون رنگ‌سنجی با استاندارد CIE L*a*b* [1] اندازه-گیری شد.

جدول۱: مواد اولیه برای سنتز نمونه‌های کبالت پیروکسن CP و کبالت اکرمانیت CA

نمونه	کلرید کبالت آب پوشیده (گرم)	دی اکسید سلیسیوم (گرم)	کربنات کلسیم (گرم)	سدیم فلوراید (گرم)
CP pigment	۲۳.۷۹٦	٤.۰۰٤	۳.۳۳٦	-
CA pigment	۱٥.۸٦٤	٤.۰۰٤	٦.٦۷۲	۰.۲٦٤

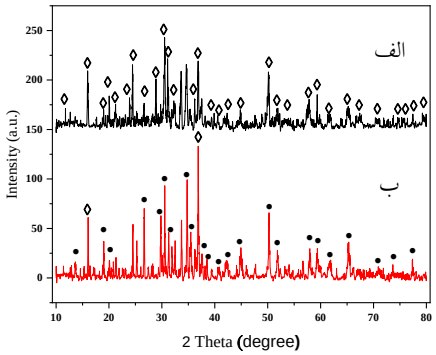
نتایج و بحث

شکل۱ طیف پراش پرتو ایکس با طول موج ۱.٥٤ انگستروم مربوط به رنگدانه‌ها سنتز شده در دمای ۱۱٥۰ درجه سانتی‌گراد را نشان می‌دهد. همان طور که مشاهده می‌شود باتوجه به قله‌های پراش پرتو می‌توان نتیجه گرفت که شکل۱-الف مربوط به کبالت اکرمانیت که ترکیب تنها از فاز $Ca_2CoSi_2O_7$ تشکیل شده‌است با شکل

[1] International Commission on Illumination

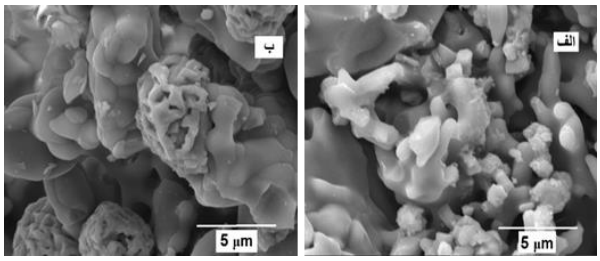
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

ساختار مونوکلینک وجود دارد، شکل۱-ب مربوط به کبالت پیروکسن است که ترکیب از دو فاز $CaCoSi_2O_6$ و $Ca_2CoSi_2O_7$ تشکیل شده‌است به ترتیب با شکل ساختار تتراگونال و مونوکلینک وجود دارد که باعث این است که رنگ رنگدانه بجای صورتی، بنفش درست بشود. همچنین، فاصله صفحات کریستالی هر دو ساختار ۲.۹ انگستروم است.



شکل۱: طیف پراش پرتو X (با طول موج ۱.۵٤ انگستروم) الف: رنگدانه کبالت اکرمانیت CA ، ب: رنگدانه کبالت پیروکسن CP، ◊ $Ca_2CoSi_2O_7$ • $CaCoSi_2O_6$

تصاویر ساخته شده و بازپخت شده در شکل۲ نشان داده شده‌است. تصاویر نمونه‌های پخت شده در دمای ۱۱۵۰ درجه سانتی‌گراد در شکل۲ آمده است. در شکل۲-الف تصویر رنگدانه کبالت اکرمانیت و در شکل۲-ب تصویر رنگدانه کبالت پیروکسن نشان داده می‌شود. همانطور که مشاهده می‌شود اندازه ذرات نمونه کبالت اکرمانیت در محدوده ۲۰۰-۱۲۰۰ نانومتر است و میانگین اندازه ذرات آن ۷٦۸ نانومتر است. اندازه ذرات نمونه کبالت پیروکسن در محدوده ۲۰۰-۲۲۰۰ نانومتر است و میانگین اندازه ذرات آن ۹۰۵ نانومتر تخمین زده شد. برای تشخیص پارامترهای مربوط به رنگ‌سنجی رنگدانه سنتز شده و رنگ چاپ آن بر روی کاشی از آزمون رنگ‌سنجی CIE L*a*b* استفاده شده‌است.



شکل۲ : تصویر SEM مربوط به رنگدانه‌ها، الف: کبالت اکرمانیت CA ، ب: کبالت پیروکسن CP.

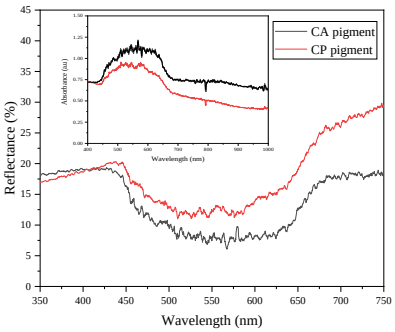
این آزمون بدین گونه است که L* در بازه ۰ تا ۱۰۰ قرار داشته و میزان روشنایی رنگ را بیان می‌کند. هرچه L* به ۱۰۰ نزدیکتر باشد نمونه روشنتر و هر چه به صفر نزدیک باشد تیره بودن نمونه را نشان می‌دهد. همچنین a* مثبت نشان دهنده میزان قرمزی، a* منفی نشان دهنده میزان سبزی، b* مثبت نشان دهنده زردی و b* منفی نشان دهنده آبی بودن نمونه است [۷]. پارامترهای رنگی رنگدانه و رنگ چاپ آن بر روی کاشی به دست آمده در جدول۲ نشان داده شده‌است. می‌توان نتیجه گرفت که رنگدانه‌های سنتز شده به رنگ بنفش و آبی به ترتیب برای رنگدانه‌ها کبالت پیروکسن و کبالت اکرمانیت هستند.

جدول۲: پارامترهای رنگ (L*,a*,b*) مربوط به رنگدانه و جوهر چاپ شده بر روی کاشی

نمونه	b *	a *	L *
CP pigment	-۸.٦۵۷	۸.۷٤۱	٤۳.۳۷۵
CA pigment	-۱٦.۹۱٦	٦.۱۸٤	۳٤.۹٤۲
CP tile	-۳۳.۱۸۱	٤.٤۵۲	۳۵.۷۵٤
CA tile	-۳۵.۰۱۰	٤.٤۸٤	٤۱.۰۳٤

به طور کلی برای رنگ بنفش طیف بازتاب از محدوده طول موج ٤۵۰-۳۸۰ نانومتر است و برای رنگ آبی طیف بازتاب از محدوده طول موج ٤۹۵-٤۵۰ نانومتر است. شکل۳ طیف بازتاب و طیف جذب مربوط به رنگدانه‌ها ساخته شده نشان داده شده‌است. مشاهده می‌شود که قله‌ی طیف‌ها در ناحیه‌ای که بیشترین بازتاب دارد پهن شده‌اند. این نشان می‌دهد که رنگدانه‌های خالص ایجاد نشده است. همچنین، رنگدانه کبالت پیروکسن بیشترین طیف بازتاب و کمترین طیف جذب نسبت به کبالت اکرمانیت را دارد.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

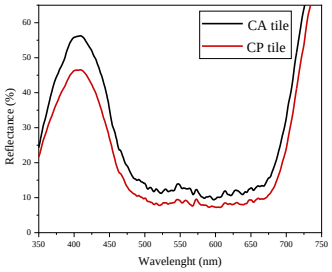


شکل۳ : طیف بازتاب و طیف جذب مربوط به رنگدانه‌های کبالت اکرمانیت CA و کبالت پیروکسن CP.

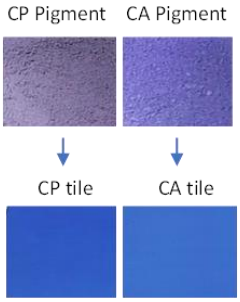
پس از چاپ مقدار عددی پارامتر b* برای نمونه کبالت اکرمانیت ۳۵.۰۱۰- و برای نمونه کبالت پیروکسن ۳۳.۱۸۱- است که نشان دهنده این است که رنگ نمونه چاپ شده آبی است. منفی‌تر بودن b* نشان دهنده شدت بیشتر رنگ آبی نمونه است. با توجه به جدول۲ مشاهده می‌شود که روشنایی نمونه چاپ شده کبالت اکرمانیت بالاتر از نمونه چاپ شده کبالت پیروکسن است. شکل٤ طیف بازتاب نوری مربوط به دو نمونه چاپ رنگدانه بر روی کاشی را نشان می‌دهد. همان طور که مشاهده می‌شود طیف‌ها در ناحیه ٤۲۵ نانومتر بیشترین بازتاب را دارند و این قله‌ها در ناحیه نور مرئی متعلق به رنگ آبی هستند. در صد بازتاب نمونه چاپ شده کبالت اکرمانیت بیشتر از نمونه چاپ شده کبالت پیروکسن است. همچنین نمونه چاپ شده کبالت اکرمانیت L*a*b* بیشتری دارد. شکل۵ تصویر رنگدانه‌ها و نمونه‌های چاپ شده را نشان می‌دهد.

نتیجه‌گیری

در این تحقیق رنگدانه‌های کبالت پیروکسن $CaCoSi_2O_6$ و کبالت اکرمانیت $Ca_2CoSi_2O_7$ با روش سرامیکی سنتز شدند. نتیجه پراش اشعه ایکس XRD نشان می‌دهد برای ساختار کبالت اکرمانیت تک فاز شده‌است و برای ساختار کبالت پیروکسن از دو فاز کبالت پیروکسن و کبالت اکرمانیت تشکیل شده‌اند. با توجه به نتایج طیف‌سنجی بازتابی و آزمایش رنگ‌سنجی، ثابت می‌شود که رنگدانه‌های تولید شده رنگدانه کبالت پیروکسن دارای رنگ صورتی- بنفش است و رنگدانه کبالت اکرمانیت دارای رنگ آبی است، چاپ رنگدانه‌های ساخته شده بر روی کاشی دارای رنگ آبی است.



شکل٤ : طیف بازتاب مربوط به چاپ رنگدانه‌ها بر روی کاشی کبالت اکرمانیت CA و کبالت پیروکسن CP.



شکل۵ : تصویر رنگدانه‌ها ساخته شده و تصویر چاپ آن بر روی کاشی کبالت اکرمانیت CA و کبالت پیروکسن CP.

سپاسگزاری

نویسندگان از شرکت کاشی مسعود و مهندس عباس اسماعیلی به دلیل همکاری در بخش صنعت تشکر و قدردانی می نمایند.

مرجع‌ها

[1] S. Vaselnia, M.K. Aminian, R.D. Banadaki, Experimental and theoretical study on the structural, electronic, and optical properties within DFT+ U, Fxc kernel for LRC model, and BSE approaches. Part II: CoSiO3 and Co2SiO4 pigments, Powder Technology, 397 (2022) 116999.
[2] T.S. Lyubenova, F. Matteucci, A. Costa, M. Dondi, J. Carda, Ceramic pigments with sphene structure obtained by both spray-and freeze-drying techniques, Powder Technology, 193 (2009) 1-5.
[3] S. Vaselnia, M.K. Aminian, R.D. Banadaki, Experimental and theoretical study on the structural, electronic, and optical properties within DFT+ U, Fxc kernel for LRC model, and BSE approaches. Part I: CoTiO3 and Co2TiO4 pigments, Powder Technology, 390 (2021) 50-61.
[4] L. Mantovani, M. Tribaudino, M. Dondi, C. Zanelli, Synthesis and color performance of CaCoSi2O6 pyroxene, a new ceramic colorant, Dyes and Pigments, 120 (2015) 118-125.
[5] I. Mihailova, D. Mehandjiev, Catalytic activity of Co-åkermanite and Co-pyroxene in oxidation reactions, Canadian Journal of Chemistry, 89 (2011) 939-947.
[6] C. Suryanarayana, Mechanical alloying and milling, Progress in materials science, 46 (2001) 1-184.
[7] A. Harris, I. Weatherall, Objective evaluation of colour variation in the sand-burrowing beetle Chaerodes trachyscelides White (Coleoptera: Tenebrionidae) by instrumental determination of CIELAB values, Journal of the Royal Society of New Zealand, 20 (1990) 253-259.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی ویژگی‌های ساختاری و تخلخل نانوذرات $NiCo_2S_4$ ساخته شده به روش هیدروترمال

حمیدی،آیدا؛ مالکی، حامد

دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان، ایران

چکیده

در این پژوهش ویژگی های ساختاری و تخلخل نانوذرات $NiCo_2S_4$ تهیه شده به روش هیدروترمال مورد مطالعه قرار گرفت. نانو ذرات نیکل کبالت سولفید (NCS) به علت تخلخل بالا در کنار رسانندگی الکتریکی مناسب گزینه مناسبی برای کاربردهای ابرخازنی هستند. *ویژگی‌های ساختاری* $NiCo_2S_4$ *با استفاده از آنالیزهای پراش پرتو ایکس(XRD) و میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی(FESEM) مورد مطالعه قرار گرفته است. نتایج XRD ساختار مکعبی با گروه فضایی F3dm را نشان می دهد، همچنین عکس های FESEM نشان میدهند که نانوذرات متخلخل نیکل کبالت سولفید به صورت گل مانند سه بعدی می باشند. با استفاده از آنالیز (EDS) نوع اتم های موجود در نمونه مشخص شد و در آنالیز (Mapping) توزیع فراوانی عناصر موجود در نمونه ارائه شد. سطح ویژه و تخلخل نمونه سنتز شده، با استفاده از آنالیز جذب نیتروژن(BET) مورد بررسی قرار گرفت و مشاهده شد نمونه سنتز شده دارای سطح ویژه خوب و تخلخل مزو می باشد.*

واژه های کلیدی: *نانوذره، نیکل کبالت سولفید، هیدروترمال، تخلخل، BET*

Study of the structural and porosity of $NiCo_2S_4$ nanoparticles synthesized by hydrothermal method

Hamidi,Aida; Maleki, Hamed

Faculty of Physics, Shahid Bahonar University of Kerman, Kerman, Iran.

Abstract

In this study, the structural properties and porosity of $NiCo_2S_4$ nanoparticles prepared by hydrothermal method were studied. Nickel cobalt sulfide (NCS) nanoparticles are a good choice for supercapacitor applications due to their high porosity along with good electrical conductivity. The structural properties of $NiCo_2S_4$ have been studied using X-ray diffraction (XRD) analysis and field emission scanning electron microscopy (FESEM). XRD results show a cubic structure with the F3dm space group, and FESEM images show that the porous nickel-cobalt sulfide nanoparticles are three-dimensional, flower-like. Using EDS analysis, the type of atoms in the sample was determined and in Mapping analysis, the frequency distribution of the elements in the sample was presented. The specific surface area and porosity of the synthesized sample were investigated using nitrogen uptake analysis (BET) and it was observed that the synthesized sample has a good specific surface area and meso porosity.

Keywords: *nanoparticle, $NiCo_2S_4$, hydrothermal, porosity, BET*

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مقدمه

مواد نانوساختار به دلیل خصوصیات فیزیکی و شیمیایی بهتر در مقایسه با مواد توده‌ای، توجه زیادی در علوم و فناوری نانو به خود جلب کرده‌اند. سولفیدها فلز انتقالی (TMS) به دلیل فعالیت های الکتروشیمیایی و رسانایی بالا به طور گسترده در بسیاری از زمینه ها مورد مطالعه قرار گرفته اند[۱]. در مقایسه با سولفید های تک فلزی، سولفید های دوفلزی به ویژه سولفید کبالت نیکل به دلیل فعالیت الکتروشیمیایی و هدایت الکتریکی بالاتر نسبت به همتایان اکسیدها و هیدروکسیدها و همچنین پایداری مکانیکی و حرارتی بهتر به طور گسترده به عنوان کاندید های امیدوارکننده در دستگاه های ذخیره سازی انرژی مورد بررسی قرار گرفته اند[۲] .

$NiCo_2S_4$ یک سولفید اسپینل است. اسپینل ها دارای فرمول عمومی AB_2X_4 هستند که در سیستم های کریستالی مکعبی متبلور می شوند، با آنیون های X (معمولا کالکوژن ها مانند اکسیژن و گوگرد) که در یک شبکه مکعبی قرار گرفته اند. کاتیون های A و B برخی یا همه ی مکان های هشت وجهی و چهار وجهی شبکه را اشغال می کنند. در این پژوهش هدف از سنتز نانوذرات $NiCo_2S_4$ به روش هیدروترمال بررسی خواص ساختاری و بررسی سطح ویژه نمونه سنتز شده جهت استفاده در الکترود ابرخازن‌ها می باشد[۳].

مواد و روش ساخت

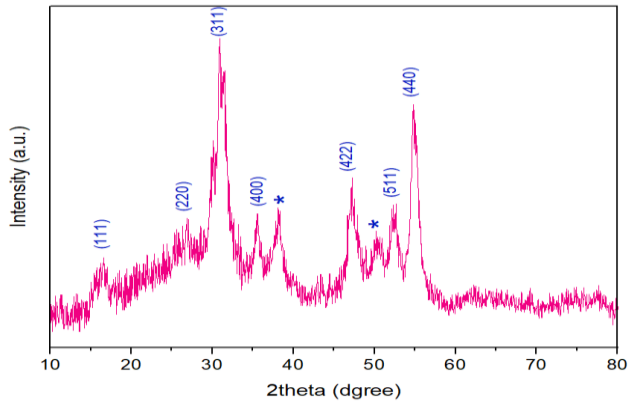
ساخت نمونه به روش هیدروترمال

در این پژوهش برای سنتز نانوذرات $NiCo_2S_4$ به روش هیدروترمال از پیش ماده‌های نیترات نیکل ۶ آبه $(Ni(NO_3)_2.6H_2O)$، نیترات کبالت ۶ آبه $(Co(NO_3)_2.6H_2O)$، اوره $CO(NH_2)_2$ و تیواستامید C_2H_5NS با درج خلوص بالا استفاده شد. در این فرآیند، ابتدا مقادیر استوکیومتری نیترات نیکل و نیترات کبالت در یک بشر در ۴۰ میلی لیتر آب دوبار تقطیر حل گردید و به مدت ۲۰ دقیقه تحت همزن مغناطیسی همزده شد که به عنوان محلول A ما در نظر گرفته می شود. سپس مقدار استوکیومتری اوره در یک بشر در ۴۰ میلی لیتر آب دوبار تقطیر حل گردید و به مدت ۳۰ دقیقه تحت همزن مغناطیسی همزده شد که به عنوان محلول B ما در نظر گرفته می شود. سپس محلول B به A به صورت قطره قطره اضافه می شود که محلول C ما را می سازد. سپس مقدار استوکیومتری تیواستامید را به محلول C اضافه می کنیم و به مدت ۱۰ دقیقه تحت همزن مغناطیسی همزده می شود. محلول حاصل در اتوکلاو ۱۰۰ میلی لیتر ریخته شد و به مدت ٦ ساعت در دمای ۱۸۰ درجه سانتی‌گراد در آون قرار داده شد. محصول به دست آمده توسط اسید نیتریک ۰/٤ مولار و ۲۰۰ میلی لیتر آب دوبار تقطیر شست و شو داده شد و در دمای ۱۰۰ درجه سانتی‌گراد به مدت ۱ ساعت خشک گردید.

نتایج و بحث

آنالیز ساختاری

شکل ۱ الگوی پراش اشعه ایکس از نمونه $NiCo_2S_4$ سنتز شده به روش هیدروترمال را نشان می‌دهد. الگوی پراش اشعه ایکس نشان می‌دهد که صفحات فاز مکعبی $NiCo_2S_4$ با گروه فضایی Fd3m و کارت استاندارد (JCPDS card no. 20-0782) مطابقت دارد[٤].



شکل ۱: پراش اشعه ایکس از نانوذرات $NiCo_2S_4$ تهیه شده به روش هیدروترمال

برای تخمین متوسط سایز نانو بلورک ها از روش دبای شرر استفاده می کنیم. در این روش:

$$D = \frac{0.89\,\lambda}{\beta\,Cos\theta} \qquad (۱)$$

که در این رابطه، D میانگین سایز ذرات، λ طول موج اشعه ایکس، β پهنای قله پراش در نصف شدت ماکزیمم برای زاویه 2θ است.

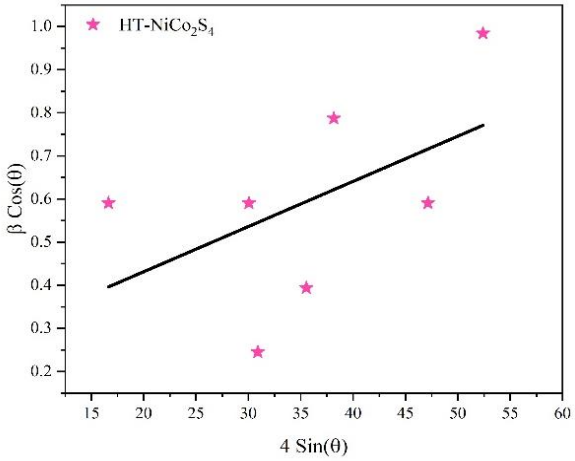
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

طبق این محاسبه اندازه متوسط قطر نانوذرات $NiCo_2S_4$ برابر با 31 نانومتر بدست آمد.

در مرحله بعد و برای بررسی بیشتر براساس روش ویلیام سون-هال عرض قله در نصف شدت بیشینه تابعی از اندازه ذرات و میکرو کرنش‌های درون شبکه ای مورد مطالعه قرار گرفت. فرمول ویلیام سون- هال برابر با رابطه (۲) می‌باشد:

$$\beta cos\theta = \frac{.89\,\lambda}{D} + 4\varepsilon sin\theta \qquad (۲)$$

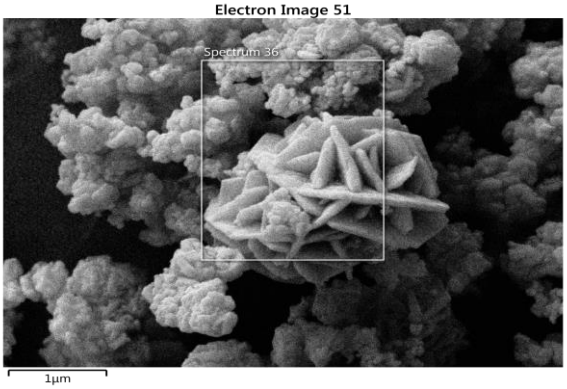
که در این رابطه ε میکرو کرنش شبکه است. در شکل ۲ نمودار ($\beta cos\theta$برحسب $4sin\theta$) برای نانوذرات $NiCo_2S_4$ نشان داده شده است. با برازش خط برای داده‌های نمودار، اندازه ذرات شبکه برابر با ٤٠ نانومتر محاسبه شد.



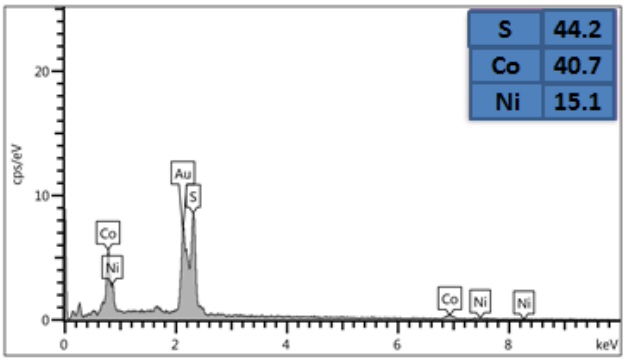
شکل ۲: آنالیز ویلیام سون-هال برای نانوذرات $NiCo_2S_4$

ریخت شناسی(مورفولوژی)

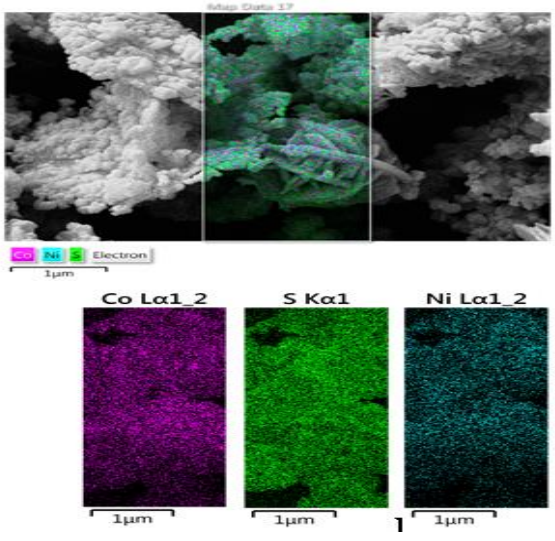
در شکل ۳ تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی از $NiCo_2S_4$ تهیه شده به روش هیدروترمال نشان داده شده است. با توجه به شکل ساختار گل مانند در کنار خوشه های مرجان مانند نشان داده شده است[۵]. تخلخل های بین نانو صفحات و نانو گل ها نشان از سطح ویژه مناسب این ماده دارد. درطیف EDS نشان داده شده در شکل ٤ پیک های نیکل، کبالت و گوگرد قابل مشاهده است که نشان دهنده ی وجود این عناصر در نمونه سنتز شده است. نوارهای مشخص شده با عنوان Au مربوط به پوشش طلای استفاده شده در روش میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی می باشد. همچنین در طرح Maping نمونه امکان ارائه توزیع فروانی عناصر موجود نشان داده شده است(شکل ۵).



شکل ۳: *تصویر FESEM نمونه* $NiCo_2S_4$ *سنتز شده به روش هیدروترمال*



شکل٤: تصاویر مربوط به نتایج حاصل از EDS نمونه$NiCo_2S_4$

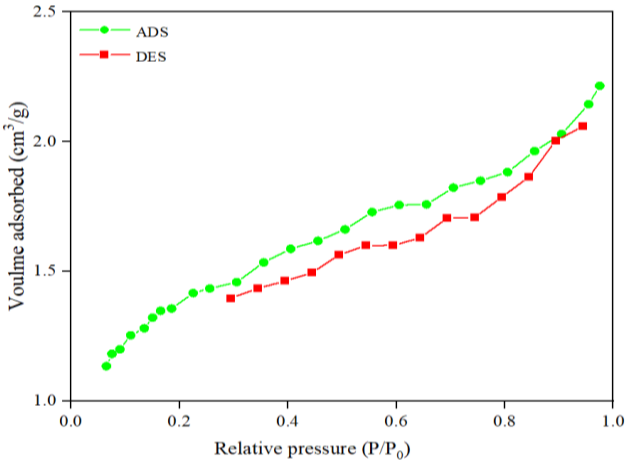


شکل ۵: تصاویر مربوط به نتایج حاصل از Mapping برای نمونه $NiCo_2S_4$ سنتز شده به روش هیدروترمال

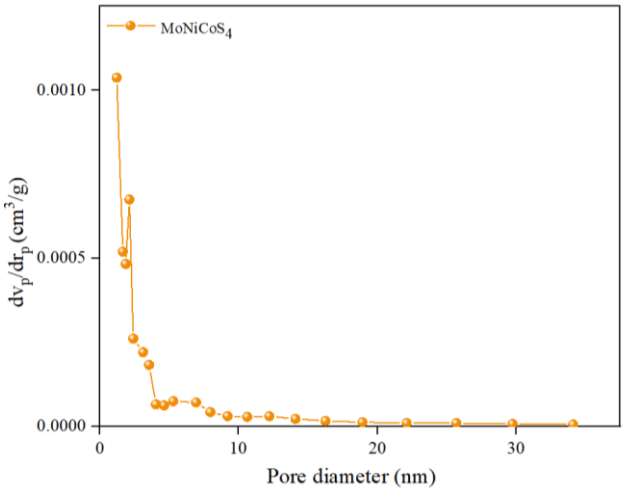
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

آنالیز واجذب/جذب نیتروژن

همانطور که در اول مقاله اشاره شد هدف اصلی این کار بررسی میزان تخلخل نانوذرات NCS برای کاربرد در ادوات ذخیره سازی انرژی است. برای بررسی سطح ویژه و توزیع اندازه منافذ نمونه $NiCo_2S_4$ از آنالیز جذب/ واجذب نیتروژن (BET) استفاده شده است. اساس کار این روش براساس سنجش میزان گاز نیتروژن جذب شده و واجذب شده توسط سطح ماده مورد بررسی و در دمای نیتروژن مایع میباشد. نمودار جذب/ واجذب نمونه $NiCo_2S_4$ متعلق به ایزوترم نوع IV با حلقه پسماند H3 است که نشان‌دهنده وجود ساختار مزوپور در نمونه آماده‌شده است(شکل ٦(الف)). سطح ویژه زیر نمودار جذب/واجذب گاز نیتروژن و میانگین قطر تخلخل ها برای $NiCo_2S_4$ به ترتیب $۳۳/۵ m^2/g$ و 2/57nm بدست آمد. علاوه بر این، ساختار مزوپور توسط داده‌های توزیع اندازه منافذ (BJH) که در قسمت ب شکل ٦ نشان داده شده است، تأییدشد. به خوبی شناخته شده است که مواد مزوپور با سطح ویژه بالا و مزوپورهای مناسب می‌توانند مکان‌های الکترواکتیو غنی و مسیرهای انتشار کوتاهی را برای انتقال بار فراهم کنند که در واکنش‌های ردوکس فارادیک مورد نیاز است.



شکل٦(الف): نمودار جذب- واجذب و اندازه تخلخل‌های $NiCo_2S_4$ سنتز شده به روش هیدروترمال



شکل٦(ب): نمودار جذب- واجذب و اندازه تخلخل‌های $NiCo_2S_4$ سنتز شده به روش هیدروترمال

نتیجه گیری

در این پژوهش نانوذرات $NiCo_2S_4$ به روش هیدروترمال سنتز شد. تجزیه و تحلیل الگوهای پراش اشعه ایکس ساختار کریستالی $NiCo_2S_4$ را نشان میدهد. تجزیه و تحلیل میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی نشان می‌دهد که نمونه سنتز شده از نانوصفحات $NiCo_2S_4$ به یکدیگر متصل شده با ساختار متخلخل تشکیل شده است. نتایج آنالیز جذب نیتروژن تایید می‌کند که نمونه دارای ایزوترم نوع IV است که برای مواد متخلخل استفاده می شود که مربوط به مواد حاوی مزوپور است که حلقه پسماند مشاهده شده در نمونه حضور مزوپور در ماده را تایید می کند.. این ماده کاندیدای مناسبی برای ساخت الکترود در باتری‌های الکتروشیمیایی و ابرخازن‌ها می باشد.

مرجع ها

[1] D. Zha, Y. Fu, L. Zhang, J. Zhu, and X. Wang, *J. Power Sources*, vol. 378, no. June 2017, pp. **31–39, 2018**

[2] Y. Zhao, H. Zhang, Y. Lin, J. Chen, K. Li, and A. Cheng, *Diam. Relat. Mater.*, vol. 108, no. March, p. **107925**, 2020,.

[3] *Guo, K., Ding, Y., Luo, J., & Yu, Z. (2018). ACS applied materials & interfaces, 10(23), 19673-19681.*

[۴] *Zhu, Y., Wu, Z., Jing, M., Yang, X., Song, W., & Ji, X. (2015). Journal of Power Sources, 273, 584-590.*

[۵] Nan, H., Liu, M., Zhang, W., Zhang, Q., Xu, J., Hu, X., & Tian, H. (2020). *Journal of Alloys and Compounds*, *832*, 155037.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

اثر اعمال کرنش هیدروستاتیک، تک‌محوری و جفت‌شدگی اسپین-مدار بر ترکیبات نیمرسانای نیم-هویسلر LiZnZ(Z=P, As, Sb): گذار به عایق توپولوژیک

جعفری ، عبدالرضا ؛ دعوت الحق، سعید؛ دهقان، علی

بخش فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شیراز، شیراز ۷۱۹۴۶

چکیده

در این مقاله با استفاده از محاسبات اصول اولیه بر مبنای تابعی چگالی، اثر اعمال کرنش هیدروستاتیک و تک محوری و همچنین جفت‌شدگی اسپین- مدار بر ترکیبات LiZnZ (Z=P, As, Sb) بررسی می‌شود. محاسبات ساختار نواری نشان می‌دهد که این ترکیبات در ثابت شبکه بهینه خود نیمه‌رسانا می‌باشند، با در نظر گرفتن جفت‌شدگی اسپین- مدار هرچند گاف انرژی به صورت جزیی کاهش می‌یابد اما همچنان به صورت نیمرسانا باقی خواهند ماند، ولی محاسبات اعمال کرنش نشان می‌دهد در انبساط معینی از ثابت شبکه بهینه انتقال فاز به عایق های توپولوژیک اتفاق می‌افتد.

واژه های کلیدی: *عایق های توپولوژیک، ترکیبات نیم هویسلر، کرنش هیدروستاتیک و تک محوری، جفت‌شدگی اسپین-مدار.*

Effect of hydrostatic and uniaxial strain and spin-orbit coupling on LiZnZ(Z=P, As, Sb) semiconductor half-Heusler compounds; transition to topological insulator

Jafari, Abdoreza; Davatolhah, Saeid; Dehghan, Ali

Department of Physics, School of science, Shiraz University, Shiraz 71946

Abstract

In this paper, the effect of hydrostatic and uniaxial strain and spin-orbit coupling on LiZnZ (Z=P, As, and Sb) compounds is investigated using ab-initio calculations based on DFT. Band structure calculations show that these compounds are semiconductor in their optimized lattice constant, although spin-orbit coupling reduces the band gap but these compounds remain trivial insulator. In certain lattice expansions or strains a transition from trivial to nontrivial topological insulator can occur.

***Keywords**: Topological Insulator, Half-Heusler Compounds, Hydrostatic and Uniaxial Strain, Spin-Orbit Coupling.*

PACS No.

مقدمه

در سال های اخیر آلیاژهای هویسلر[۱] در زمینه خصوصیات فیزیکی گوناگونی مورد توجه قرار گرفته است[۱-٤]. در حالت کلی این آلیاژها به دو گروه اصلی تقسیم‌بندی می‌گردند: ترکیبات تمام-هویسلر[۲] و نیم-هویسلر[۳] با کشف عایق‌های توپولوژیک[٤] با ساختار سولفید روی تحقیقات زیادی جهت یافتن این خاصیت در ترکیبات نیم-هویسلر در زمینه فیزیک ماده چگال انجام گردیده است[۵-۷]. عایق های توپولوژیک به دلیل خاصیت جالب توجه سطحی خود مورد توجه بسیاری از محققان قرار گرفته است. این مواد در حجم خود عایق می‌باشند ولی سطح آن‌ها خاصیت رسانایی با قفل شدگی اسپین-تکانه را نشان می‌دهند. در این مواد حالتهای حجمی گاف‌دار بوده ولی حالت‌های سطحی بدون گاف

[۱] Heusler Alloys
[۲] Full-Heusler
[۳] Half-Heusler
[٤] Topological Insulators

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

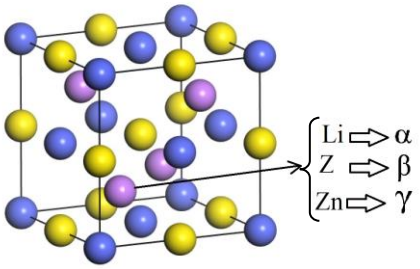
هستند. اولین عایق توپولوژیک دوبُعدی در چاه کوانتمی ترکیب روی-سولفید HgTe پیشنهاد گردید[۸]. خانواده عایق‌های توپولوژیک در ترکیبات سه‌بعُدی نیز گسترش پیدا کرد که به عنوان مثال می‌توان ترکیبات ترادایمید[۵] Bi_2Se_3 و Bi_2Te_3 و نیم-هویسلر LaPtBi اشاره کرد[۹]. در نظر گرفتن جفت‌شدگی اسپین-مدار و ایجاد اعوجاج ساختاری یا کرنش[۶] خارجی به صورت هیدرستاتیک[۷] تک‌محوری[۸] و یا دومحوری[۹] باعث ایجاد یک گاف نواری حجمی در ترکیبات می‌گردد و در بسیاری مورد می‌تواند باعث ایجاد عایق‌های توپولوژیک (غیربدیهی) از ساختارهای نیمرسانای اولیه (عایق‌های بدیهی) گردد[۱۰]. اثر جفت‌شدگی اسپین-مدار در اتم های سنگین تر بیشتر می‌باشد، در اتم های سبک اثر کمتری بر گاف انرژی خواهند داشت. در حالت کلی با رسم ساختار نواری ترکیبات نیم-هویسلر می‌توان عایق‌های توپولوژیک را پیش‌بینی کرد. شاخصه ساختار نواری عایق های توپولوژیک وارونگی نواری است.

روش محاسباتی

محاسبات ساختار نواری با استفاده از پکیج تمام پتانسیل Wien2k انجام گردیده است که روش محاسباتی آن بر مبنای موج تخت بهبود یافته‌ی خطی است. جهت پتانسیل تبادلی-همبستگی از تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA) استفاده شده است. جهت محاسبات در منطقه اول بریلوین 20,000 نقطه در نظر گرفته شده است. همچنین $R_{MT} \times K_{\max} = 7$ که R_{MT} شعاع کره مافین-تین[۱۰] و $K_{\max}$ و $l_{\max} = 10$ به ترتیب بیشینه اندازه موج و بیشینه عدد کوانتمی زاویه‌ای در بسط توابع موج کره‌های مافین-تین و انرژی جداسازی مغزه و رسانش برابر 6- درنظر گرفته شده است.

ترکیبات نیم-هویسلر

ساختار بلوری ترکیبات نیم-هویسلر (در اینجا LiZnZ) به صورت سه ساختار مکعبی مرکز سطحی تو در تو با گروه فضایی $F\bar{4}3m$ و علامت اختصاری $C1_b$ می‌باشد. بر این اساس سه جایگاه برای جانشانی اتم‌های پایه ساختار مرکز سطحی وجود دارد: $(0,0,0)a$، $(0.25,0.25,0.25)a$ و $(0.5,0.5,0.5)a$ که با توجه به ترتیب قرار گرفتن اتم‌ها در موقعیت‌های متفاوت، سه حالت غیرتکراری ساختاری ممکن می‌باشد. a ثابت شبکه مکعبی می‌باشد. همانگونه که در شکل ۱ نشان داده است موقعیت اتم وسط، فاز ساختاری را مشخص می‌کند. چنانچه هر یک از اتم‌های Li، Z و یا Zn در موقعیت وسط قرار گیرد، به ترتیب ساختار را α، β و γ می‌نامیم.



شکل۱ : حالت های مختلف ساختاری α، β و γ برای ترکیب‌های LiZnZ

جهت مشخص شدن کمینه انرژی فاز هر ترکیب، در شکل شماره ۲ حالت های α، β و γ رسم شده است. همانگونه که از نمودارها مشخص می‌باشد برای دو ترکیب LiZnP و LiZnAs فاز β و برای LiZnSb فاز γ از نظر انرژی نسبت به دو فاز دیگر پایدارتر می‌باشد.

در جدول شماره ۱ ثابت شبکه بهینه برای فاز پایدار ترکیبات به همراه ثابت شبکه تجربی آورده شده است، نتایج بدست آمده با نتایج تجربی هم‌خوانی مناسبی دارد.

جدول۱ : ثابت شبکه ترکیبات بر حسب A^0

ترکیب	محاسبه شده	تجربی
LiZnP-β	۵,۷۶	۵,۷۶ [۱۱]
LiZnAs-β	۵,۹۷	۵,۹٤ [۱۲]
LiZnSb-γ	٦,۳۱	٦,۲۳[۱۳]

ساختار نواری

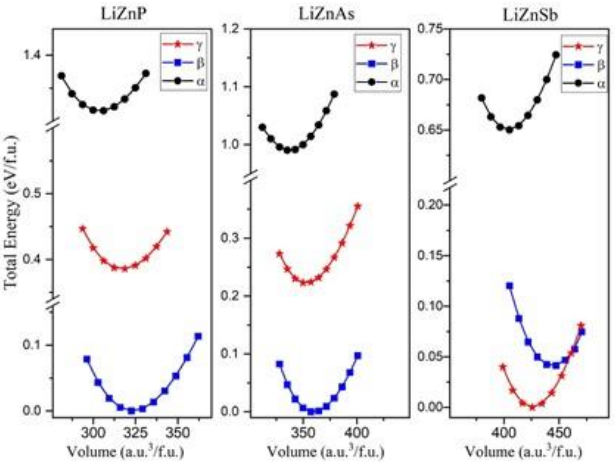
در شکل۳ ساختار نواری مربوط به هر سه ترکیب در ثابت شبکه بهینه برای حالتهایی که جفت‌شدگی اسپین مدار در نظر

---

[۵] Tetradymite
[۶] Strain
[۷] Hydrostatic Strain
[۸] Uniaxial Strain
[۹] Biaxial Strain
[۱۰] Muffin-tin

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

گرفته شده و یا صرفنظر شده است، نشان داده شده است. مطابق ساختارهای نواری، تمای این ترکیبات از خود خاصیت نیم رسانایی نشان می‌دهند. همانگونه که مشخص می‌باشد به جز LiZnP، بقیه گاف انرژی مستقیم دارند.

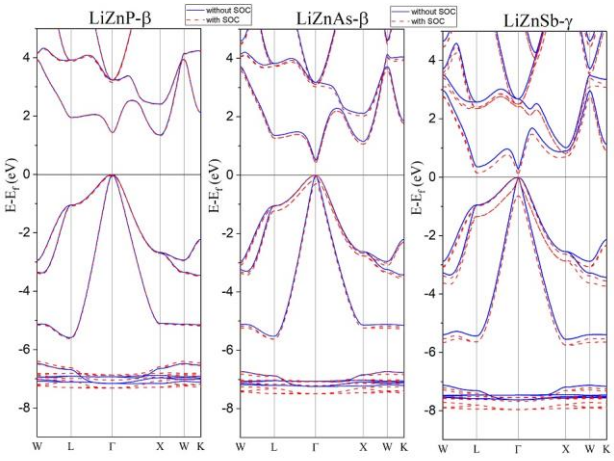


شکل۲: انرژی بر حسب حجم برای حالت های ساختاری متفاوت α، β و γ

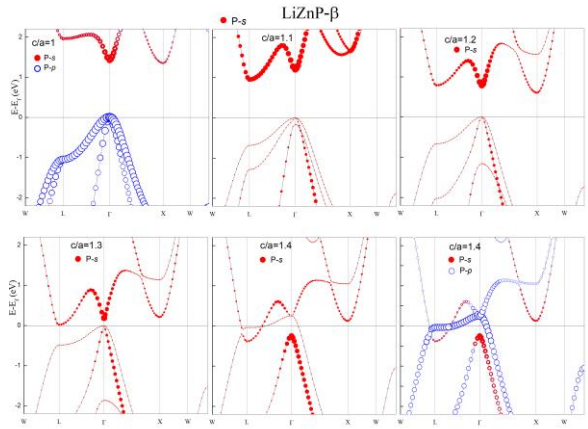
در حالتی که جفت‌شدگی اسپین–مدار در نظر گرفته شده است گاف انرژی کمی کاهش یافته است، با افزایش عدد اتمی مربوط به اتم Z اثر جفت‌شدگی قوی‌تر شده و کاهش گاف انرژی نیز محسوس‌تر می‌باشد. همچنین با اعمال جفت‌شدگی اسپین–مدار تبهگنی نوارهای انرژی نیز کاهش می‌یابد ولی همانطور که از نمودارها مشخص است در ترکیبات با Z سنگین‌تر، تبهگنی به شکل واضح‌تری کاهش می‌یابد. اما با در نظر گرفتن جفت‌شدگی اسپین–مدار گذاری به عایق‌های توپولوژیک اتفاق نمی‌افتد. به عبارت دیگر اثر اسپین–مدار باعث معکوس شدن حالتها در دو سوی گاف انرژی نمی شود.

کرنش هیدروستاتیک و تک‌محوری

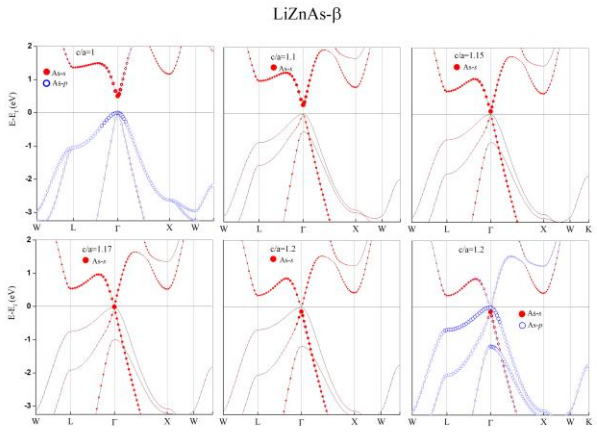
در شکل٤ و ٥ به ترتیب اثر اعمال کرنش تک‌محوری و هیدروستاتیک بر ساختار نواری ترکیبات LiZnZ نشان داده شده است. در عایق‌های بدیهی (نیمرسانا) ترتیب نوارها در نقطه Γ و در نزدیکی سطح فرمی به گونه‌ای است که اربیتالهای پیوندی p پایدارتر از اربیتالهای ضدپیوندی s می‌باشند، چنانچه این نظم جابه‌جا گردد، عایق‌های توپولوژیک بوجود می‌آیند.



شکل۳ : ساختار نواری ترکیبات LiZnZ با در نظر گرفتن جفت‌شدگی اسپین–مدار (نمودار خط چین) و بدون جفت‌شدگی (نمودار خط کامل).

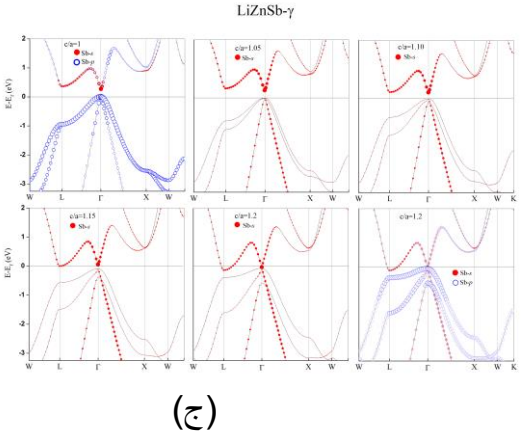


(الف)



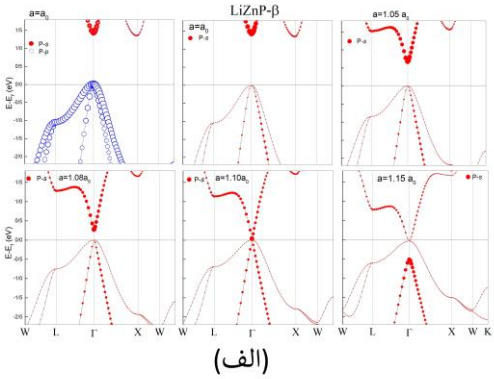
(ب)

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

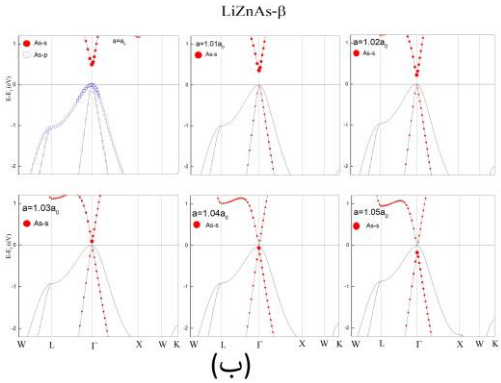


(ج)

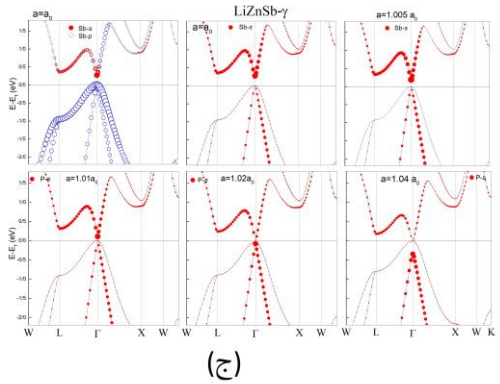
شکل ٤ : اثر اعمال کرنش تک‌محوری بر ترکیبات LiZnZ



(الف)



(ب)



(ج)

شکل ٥ : اثر اعمال کرنش هیدروستاتیک بر ترکیبات LiZnZ

در شکل ٤ نشان داده شده است که با اعمال کرنش تک‌محوری در راستای محور c به اندازه‌های $c/a=1.4$ برای LiZnP و $c/a=1.2$ برای LiZnAs و LiZnSb گذار به عایق توپولوژیک اتفاق می‌افتد. لازم به ذکر است که در کرنش تک‌محوری حجم ثابت نگه داشته شده است. شکل ٥ نیز با اعمال کرنش هیدروستاتیک به اندازه ۱۵٪، ٥٪ و ٤٪ ثابت شبکه بهینه به ترتیب بر ترکیبات LiZnP، LiZnAs و LiZnSb جابه‌جایی نظم اربیتالهای s,p بوجود می‌آید و باندهای ضدپیوندی s پایدارتر از باندهای پیوندی p می‌گردد و درنتیجه گذاری از عایق بدیهی به عایق‌های غیربدیهی (توپولوژیک) اتفاق می‌افتد.

نتیجه گیری

در این مقاله با استفاده از محاسبات اصول اولیه اثر اسپین–مدار و همچنین کرنش هیدروستاتیک و تک‌محوری بر ترکیبات LiZnZ(Z=P, As, Sb) جهت یافتن عایق‌های توپولوژیک انجام گرفته است. محاسبات نشان می‌دهد که اثر اسپین–مدار منجر به عایق های توپولوژیک نمی‌گردد، اما با اعمال کرنش معینی، در حالت‌های تک‌محوری و هیدروستاتیک گذار اتفاق می‌افتد.

مرجع‌ها

[۱] S. Kacimi, H. Mehnane, A. Zaoui; "*Journal of Alloys and Compounds*". **587** (2014) 451-468.
[۲] M. I. Babalola, B.E. Iyorzor; "*Journal of Magnetism and Magnetic Materials*"; **491** (2019) 165560-6.
[۳] F. F. Tafti, *et.al*; "*PHYSICAL REVIEW B*"; **87** (2013) 184504-5.
[٤] B. W. Montag, P. B. Ugorowski, K. A. Nelson, N. S. Edwards, D. S. McGregor; "*Nuclear Inst. and Methods in Physics Research, A*"; **836** (2016) 30-36.
[٥] S. Chadov, X. Qi, J. Kubler, G. H. Fecher, C. Felser, and S. C. Zhang; "*Nature Mater*"; **9** (2010) 541.545.
[٦] H. Lin, L. A. Wray, Y. Xia, S. Xu, S. Jia, R. J. Cava, A. Bansil, and M. Z. Hasan; "*Nature Mater*"; **9** (2010) 546-549.
[۷] D. Xiao, Y. Yao, W. Feng, J. Wen, W. Zhu, X. Q. Chen, G. M. Stocks, and Z. Zhang; "*Phys. Rev. Lett.*"; **105** (2010) 096404-4.
[۸] M. Konig, S. Wiedmann, C. Brune, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X. L. Qi, and S. C. Zhang; "*Science*"; **318** (2007) 766-770.
[۹] H. Zhang, C. X. Liu, X. L. Qi, X. Dai, Z. Fang, and S. C. Zhang; "*Nature Phys.*"; **5** (2009) 438-442.
[۱۰] W .Feng, W .Zhu, H. H. Weitering, G. M. Stocks, Y .Yao, and D . Xiao; "*Phys.Rev.B*"; 85 (2012) 195114-8.
[۱۱] K. Kuriyama and T. Katoh; "*Phys. Rev. B*"; **37** (1988) 7140.
[۱۲] K. Kuriyama and F. Nakamura; "*Phys. Rev. B*"; **36** (1987) 4439.
[۱۳] M. A. White , G. J. Miller and J. Vela; "*J. Am. Chem. Soc.*"; **138** (2016) 14574.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

ساخت نانوکامپوزیت اکسید نیکل/کربن و بررسی عملکرد فوتوکاتالیستی آن

کبیری، پریسا[۱]؛ کاظمی‌نژاد، ایرج [۱و۲]؛ رحیمی، عاطفه[۱]

[۱] گروه فیزیک دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز

[۲] مرکز تحقیقات لیزر و پلاسما دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز

چکیده

در پژوهش حاضر، نانو کامپوزیت اکسید نیکل/کربن توسط دو مرحلهٔ هم رسوبی و سپس آبی-حرارتی ساخته شد. خواص ساختاری و ریخت‌شناسی نمونه‌های تهیه‌شده توسط آنالیز پراش پرتو ایکس(XRD) ، طیف‌سنجی رامان (Raman) و میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی(FESEM) مورد مطالعه قرار گرفت. علاوه‌بر این، عملکرد فوتوکاتالیستی نانوکامپوزیت اکسید نیکل/کربن مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که نانوکامپوزیت اکسید نیکل/کربن بازده فوتوکاتالیستی بیشتری را نسبت به نانو ذرات اکسید نیکل در تخریب رنگ رودامین B دارد.

واژه های کلیدی: *نانوکامپوزیت اکسید نیکل/کربن، فوتوکاتالیست، هم‌رسوبی، آبی - حرارتی، رودامین B.*

Synthesis of Nickel oxide/Carbon nanocomposite and investigation of its photocatalytic performance

Kabiri, Parisa[1]; Kazeminezhad, Iraj[1, 2]; Rahimi, Atefeh[1]

[1] Department of Physics, Shahid Chaman University of Ahvaz, Iran
[2] Center for Research on Laser and Plasma, Shahid Chamran University of Ahvaz, Iran

Abstract

In present research, Nickel oxide/Carbon nanocomposite was synthesized via two steps including coprecipitation and then hydrothermal methods. Structural properties and morphology of as-prepared samples were studied by X-ray diffraction (XRD), Raman spectroscopy and field emission scanning electron microscopy (FESEM). In addition, the photocatalytic performance of Nickel oxide/Carbon nanocomposite was investigated. The results indicated that Nickel oxide/Carbon nanocomposite has greater photocatalytic efficiency compared to Nickel oxide nanoparticles on degradation of Rhodamine B.

Keywords*: Nickel oxide/Carbon nanocomposite, photocatalyst, Coprecipitation, hydrothermal, Rhodamine B*
PACS No.61

مقدمه

امروزه با توجه به حجم کم آب‌های شیرین موجود در زمین و مشکلات مربوط به آلودگی آب‌ها، روش‌های حذف آلاینده‌های سمی از آب‌های سطحی و زیرزمینی مورد توجه قرار گرفته‌اند. این آلاینده‌ها مشکلات محیطی بسیار و بیماری‌های گوناگونی در انسان‌ها و سایر موجودات زنده ایجاد می‌کنند [۱]. از مهم‌ترین مشکلات روش‌های رایج تصفیهٔ آب، عدم امکان پاک‌سازی آلاینده‌هایی با غلظت کم و سمی بودن بعضی آلاینده‌هاست که به سادگی تصفیه نمی‌شوند. به همین دلیل توسعهٔ روش‌های ارزان و دوست‌دار محیط‌زیست برای حذف این مواد مضر از محیط و آب-های زیرزمینی به چالشی بحرانی تبدیل شده است [۲،۳]. فوتوکاتالیست‌ها آن دسته از کاتالیزورها هستند که با تابش نور، فعال شده و آلاینده‌های موجود در هوا یا آب را به مواد کم ضرر مانند آب و دی‌اکسید کربن تبدیل می‌کنند [٤]. امروزه استفاده از فوتوکاتالیست‌های نیم‌رسانا یکی از روش‌های کارآمد برای حذف

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

آلاینده‌های زیست‌محیطی است که توجه زیادی را به خود جلب کرده‌اند [۵،٦]. اکسیدهای فلزی نیم‌رسانا در مقابل نور مرئی و فرابنفش خواص فوتوکاتالیستی خوبی از خود نشان می‌دهند. اکسید نیکل یک نیم‌رسانای نوع p با گاف انرژی در محدوده ۳٫٤eV تا ٤٫۲eV است که اخیراً به‌دلیل سمیت کم، خواص الکتریکی و نوری و پایداری شیمیایی عالی مورد توجه قرار گرفته‌است [۷]. امروزه نانوذرات اکسید نیکل در حسگرها، آهنرباها، ابرخازن‌ها، سلول‌های‌خورشیدی، کاتالیست‌ها و حتی در زیست داروها به کار می‌روند [۸]، اما کارآیی کم اکسید نیکل خالص در مقابل نور مرئی به دلیل بزرگی گاف انرژی، موجب کاهش بازده در تبدیل انرژی‌خورشیدی می‌شود. یکی از راه‌های بهبود عملکرد فوتوکاتالیستی اکسیدهای فلزی، ترکیب نمودن آن‌ها با مواد کربنی (نانولوله‌های کربنی، اکسید گرافن و یا نانوذرات کربن) است که به دلیل داشتن خواص منحصر به‌فردشان همچون رسانندگی الکتریکی بالا و تحرک‌پذیری حامل‌های بار به عنوان فوتوکاتالیست جهت تجزیهٔ رنگ‌های آلی مؤثر واقع شده است. تحقیق حاضر به بررسی ساختار و عملکرد فوتوکاتالیستی نانو کامپوزیت اکسید نیکل/کربن اختصاص یافته است.

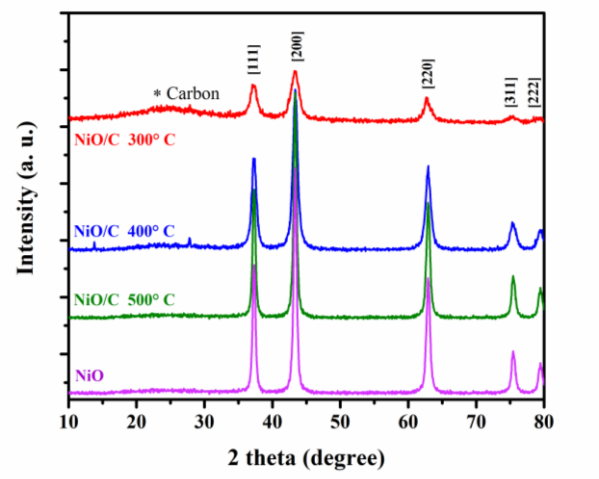
روش تجربی

برای ساخت نانوذرات اکسید نیکل مقدارمشخصی نشاسته به ۳۰۰ میلی‌لیتر آب یون‌زدایی شده افزوده، سپس پودر نیترات نیکل ٦ آبه را در حجم معینی آب یون‌زدایی شده حل کرده به آن می‌افزاییم. با افزودن آمونیاک pH محلول را تنظیم نموده و با همزن مغناطیسی به مدت ۳ ساعت هم‌زده سپس محلول را کنار می گذاریم تا رسوبات شکل بگیرد. رسوبات بدست آمده شستشو داده شده و محصول حاصل در آون خشک گردید. پودر به‌دست آمده برای پخت در کوره با دمای معین قرار گرفت [۹-۱۱]. در مرحلهٔ بعد برای ساخت نانوکامپوزیت اکسید نیکل/کربن از روش آبی-حرارتی استفاده شد. ابتدا مقدار معینی گلوکز در آب یون‌زدایی شده اضافه کرده، سپس مقدار مشخصی پودر اکسید نیکل را به آن افزوده و به مدت زمان معینی هم می‌زنیم [۱۲]. بعد از هم‌خوردن محلول به‌درون اتوکلاو از جنس استیل ضدزنگ منتقل شد. اتوکلاو برای ۱۲ ساعت در آون با دمای ۱۸۰ $^{\circ}C$ قرار داده شد. درنهایت رسوبات با آب و اتانول شستشو داده شد و پس از خشک شدن در آون، پودر به‌دست آمده در کوره در دماهای مختلف ۳۰۰ $^{\circ}C$، ٤۰۰ $^{\circ}C$ و ۵۰۰ $^{\circ}C$ بازپخت شد [۱۳،۱٤].

بحث و نتایج

بررسی الگوی پراش پرتو ایکس

به‌منظور تعیین ساختار بلوری نمونه‌ها، از آنالیز XRD استفاده شد. شکل ۱ الگوی پراش پرتوی ایکس مربوط به نمونه‌های تهیه‌شده را نشان می‌دهد. الگوی پراش اکسید نیکل با کارت استاندارد (JCPDS No.71-1179) مطابقت دارد.



شکل ۱: الگوی پراش پرتوی ایکس مربوط به اکسید نیکل و نانوکامپوزیت‌های اکسید نیکل/کربن با دماهای بازپخت متفاوت.

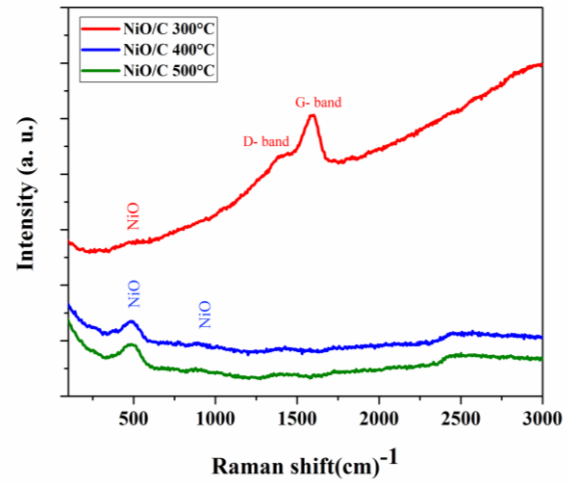
همان‌گونه که مشاهده می شود در نانوکامپوزیت NiO/C 300°C پیک پهن مربوط به کربن آمورف دیده می‌شود (JCPDSNo.800017). قله‌های واقع در ۳۷/٤°، ٤۳/۵°، ٦۳°، ٤/۷۵° و ۷۹/٦° در محل صفحاتی است که در شکل ۱ نشان داده‌شده‌است. همان‌طور که در شکل ۱ دیده می‌شود با کاهش دمای‌پخت نانوکامپوزیت تا 300°C پیک پهن مربوط به کربن رشد کرده است و از شدت قله‌های مربوط به اکسید نیکل کاسته شده است.

نتایج آنالیز رامان

شکل ۲ طیف رامان مربوط به نانوکامپوزیت‌های اکسید نیکل/کربن با دماهای بازپخت متفاوت می‌باشد. همان‌طور که مشاهده می‌شود در دمای ٤۰۰ و ۵۰۰ درجهٔ سانتی‌گراد قله‌های

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

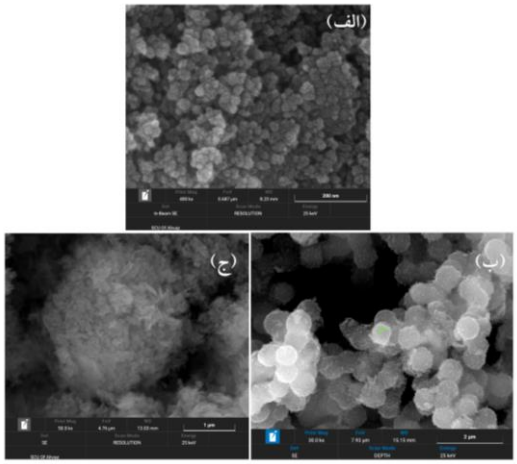
مربوط به کربن حذف شده است. همچنین نتایج به‌دست آمده نشان داد قله‌های مربوط به اکسید نیکل با گزارش‌های پیشین مطابقت دارد. در طیف مربوط به نانوکامپوزیت NiO/C 300°C قلهٔ مربوط به NiO حدود $500\ cm^{-1}$ و دو قله‌ی مربوط به کربن در حدود $1312\ cm^{-1}$ و $1582 cm^{-1}$ می‌باشد. نتایج طیف‌سنجی رامان با آنالیز XRD مطابقت دارد.



شکل ۲ : طیف‌سنجی رامان مربوط به نانوکامپوزیت‌های اکسید نیکل/کربن با دماهای بازپخت متفاوت.

نتایج میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی

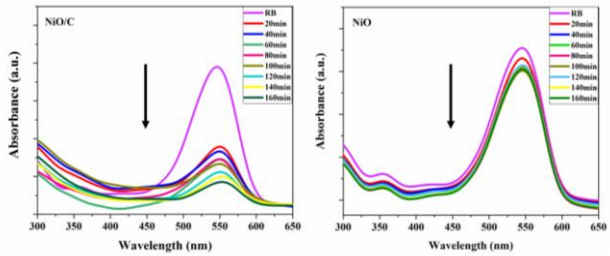
شکل ۳ تصاویر مربوط به اکسید نیکل و نانوکامپوزیت NiO/C 300°C را نشان می‌دهد. در شکل ۳ ب نانو ذرات NiO بر روی کره های کربنی پراکنده شده‌اند.



شکل ۳ : تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی الف) نانو ذرات NiO و ب و ج) نانوکامپوزیت NiO/C 300°C با بزرگنمایی‌های متفاوت.

بررسی عملکرد فوتوکاتالیستی

به‌منظور بررسی عملکرد فوتوکاتالیستی نانوکامپوزیت ساخته‌شده و مقایسه آن با اکسید نیکل، ابتدا ۱۰۰میلی‌گرم فوتوکاتالیست را به ۱۰۰میلی‌لیتر محلول رنگی رودامین B با غلظت 10 mg/L، افزوده گردید [۱۵]. به‌منظور تعیین زمان تعادل جذب و واجذب، مخلوط در تاریکی در مدت زمان معین قرار داده شد. سپس مخلوط مشابهٔ دیگری تهیه گردید، پس از مدت‌زمان تعیین‌شده در تاریکی و به تعادل رسیدن جذب و واجذب، اولین نمونه‌برداری به‌عنوان نقطهٔ صفر صورت گرفت، و پس از آن با روشن کردن لامپ فرابنفش درون فوتوراکتور، به مدت ۱۶۰ دقیقه از محلول، نمونه‌برداری صورت گرفت. شکل ٤ طیف‌های جذبی محلول‌های رنگ رودامین B برای نانو ذرات NiO و نانوکامپوزیت نانوکامپوزیت NiO/C 300°C را نشان می‌دهد. این محلول‌ها با فاصلهٔ زمانی ۲۰ دقیقه از مخلوط رنگ و فوتوکاتالیست در معرض تابش فرابنفش، برداشته شدند و پس از جدا کردن فوتوکاتالیست با استفاده از دستگاه سانتریفیوژ، طیف-های مربوطه توسط طیف‌سنج UV-vis اندازه‌گیری شدند.

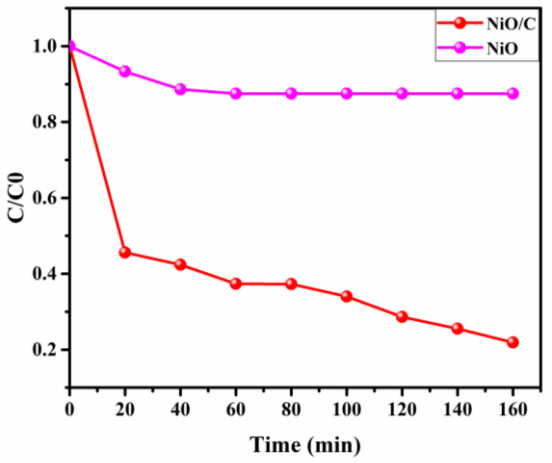


شکل ٤ :الف) طیف‌های جذبی محلول‌های رنگ رودامین B مربوط به نانو ذرات NiO و نانوکامپوزیت NiO/C 300°C.

شکل ٤ طیف‌های جذبی طیف‌سنجی فرابنفش–مرئی نانو ذرات NiO و نانوکامپوزیت NiO/C 300°C را تحت تابش فرابنفش نشان می‌دهند.

شکل ۵ میزان عملکرد فوتوکاتالیستی نانو ذرات NiO و نانوکامپوزیت NiO/C 300°C را نشان می‌دهد. بر اساس این نمودار C و C_0 به ترتیب نشان‌دهندهٔ تغییرات غلظت آلاینده در زمان t و غلظت اولیهٔ آلاینده می‌باشند.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل ۵: میزان تجزیهٔ رنگ رودامین B توسط نانو ذرات NiO و نانوکامپوزیت NiO/C 300°C.

میزان تجزیهٔ رنگ رودامین B مربوط به نانو ذرات NiO و نانوکامپوزیت NiO/C 300°C در مدت‌زمان ۱۶۰ دقیقه به ترتیب ۱۲٫۵٪ و ۷۸٪ می‌باشد. عملکرد فوتوکاتالیستی نمونه‌ها نشان داد که حضور کربن در نانوکامپوزیت NiO/C تا حد زیادی منجر به بهبود عملکرد فوتوکاتالیستی می‌گردد.

نتیجه‌گیری

در این تحقیق از نیترات نیکل٦ آبه به‌عنوان پیش مادهٔ اکسید نیکل و گلوکز به‌عنوان پیش مادهٔ کربن کروی در ساخت دومرحله‌ای نانوکامپوزیت NiO/C استفاده شد. نتایج الگوی پراش پرتوی ایکس تأیید کرد که با افزایش دمای پخت نانوکامپوزیت میزان کربن موجود کاهش می‌یابد و میزان بلورینگی اکسید نیکل افزایش می‌یابد. در بررسی عملکرد فوتوکاتالیستی نمونه‌های تهیه‌شده مشاهده گردید، کربن منجر به بالا رفتن بازده فوتوکاتالیستی نمونهٔ کامپوزیتی نسبت به نانو ذرات NiO در تخریب رنگ رودامین B شده است.

مرجع‌ها

[1] A. Vosoughifar, "Photodegradation of dye in waste water using $CaWO_4$/NiO nanocomposites; Co-precipitation preparation and characterization," *J. Mater. Sci. Mater. Electron.* **29**, 3194–3200 (2018).

[2] Duraisamy, K. Kandiah, R. Rajendran, *et al*. "Electrochemical and photocatalytic investigation of nickel oxide for energy storage and wastewater treatment," *Res. Chem. Intermed*. **44**, 5653–5667 (2018).

[3] Qamar, M.A. Gondal, Z.H. Yamani, "Synthesis of nanostructured NiO and its application in laser-induced photocatalytic reduction of Cr(VI) from water," *J. Mol.Catal. A : Chem*. **341**, 83 –88 (2011).

[4]. قائمی زاده.مرضیه، خواجه مهریزی.محمد،"کاربرد فوتوکاتالیست‌ها و عوامل مؤثر بر آن‌ها در تصفیهٔ پساب‌های رنگی". *نشریه علمی مطالعات در دنیای رنگ* (۲) ۹، ۲۰ـ۹ (۱۳۹۸).

[5] R. Dave Sushma, "Use of Nanoparticles in Water Treatment: A review," *Int.Res.J.Environ. Sci.* **4**, 103–106 (2015).

[6] Andrew Mills, Stephen Le Hunte, "An overview of semiconductor photocatalysis," *J. Photochem. Photobiol. A: Chem.* **108** (1), 1-35 (1997).

[7] M. Shanthakumari, R. Sree Latha, "Structural, optical and photocatalytic properties of Nio nanoparticles," Malaya J. of Matematik, **S**(2), 4942-4946 (2020).

[8] Suoyuan Lian,Hui Huang,Jianming Zhang, *et al*. "One-step solvothermal synthesis of ZnO–carbon composite spheres containing different amounts of carbon and their use as visible light photocatalysts," *Solid State Commun*. 155, 53-56 (2013).

[9] S.Vijayakumar, S.Nagamuthu and G.Muralidharan, "Porous NiO/C Nanocomposites as Electrode Material for Electrochemical Supercapacitors" *ACS Sustainable Chem. Eng.* 1, 9, 1110–1118(2013)

[10] X.H. Huang, *et al*. "Spherical NiO-C composite for anode material of lithium ion batteries" *Electrochimica Acta*, **52**, 4177–4181 (2007). ۲۲

[11] A.Q. Mugheri, *et al*. "Facile efficient earth abundant NiO/C composite electrocatalyst for the oxygen evolution reaction," *RSC Adv.* **9**, 5701-5710 (2019).

[12] Gang Chen, Hongtao Guan, Chengjun Dong, *et al*. "Synthesis of coreshell carbon sphere@nickel oxide composites and their application for supercapacitors," *Ionics* 1-9 (2017).

[13] Yun Hau Ng, Shigeru Ikeda, Michio Matsumura, *et al*. "A perspective on fabricating carbon-based nanomaterials by photocatalysis and their applications," *Energy Environ. Sci*. **5**, 9307-9318 (2012).

[14] Camaego, P.H.C, Satyanarayana, *et al.* "Nanocomposites: Synthesis, Structure, Properties and New Application Opportunities," *Mat.Res*. **12**, 1-39 (2009).

[15] S.Dharmraj Khairnar, V.Shankar Shrivastava, "Facile synthesis of nickel oxide nanoparticles for the degradation of Methylene blue and Rhodamine B dye: a comparative study," *J.Taibah Univ. Sci*. **13**, (2019).

[16] Xinshan Rong, *et al*. "Adsorption–photodegradation synergetic removal of methylene blue from aqueous solution by NiO/graphene oxide nanocomposite," *Powder Tech*. **275**, 322-328 (2015).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

شبیه سازی اشباع مغناطیسی آلیاژ گالفنول با استفاده از نرم افزار کامسول جهت استفاده در حسگرهای مغناطیسی

حق پرست ، میثم[۱] ؛ طهرانچی، محمدمهدی[۱] ؛ حمیدی سنگدهی، سیده مهری[۱]

[۱]پژوهشکده لیزر و پلاسما دانشگاه شهید بهشتی تهران، میدان شهید شهریاری، اوین، تهران

چکیده

یکی از خواص مواد فرومغناطیس خاصیت مغناطوتنگش می باشد که در آلیاژ گالفنول به خوبی قابل مشاهده است. از این رو از این آلیاژ در ساخت حسگرهای مغناطوالکتریک می توان استفاده کرد. برای ساخت این نوع حسگرها بهترین روش شبیه سازی آنها به منظور بهینه سازی ساختار و لایه بندی می باشد. ما در این مقاله نمودار مغناطش و مغناطش اشباع آلیاژ گالفنول را توسط نرم افزار کامسول شبیه سازی کردیم. این ماده در میدان مغناطیسی ۱۵ mT به اشباع رسید. همچنین در محدوده ٤ mT داراری بیشترین شیب برای تغییرات مغناطش می باشد، همچنین جفت شدگی مغناطومکانیکی ۰,۷٦ باعث می شود که این آلیاژ مناسب برای ساخت حسگرهای مغناطوالکتریک باشد.

واژه های کلیدی: *مغناطش اشباع، مغناطوتنگش، حسگرهای مغناطیسی، گالفنول*

Simulation of magnetic saturation of galfenol alloy for use in magnetic sensors by Comsol software

Haghparast, Meisam[1]; Tehranchi, Mohammad Mehdi[1]; Hamidi Sangdehi, Seyedeh Mehri[1]

[1] Laser and Plasma Research Institute, Shahid Beheshti University, Tehran

Abstract

One of the properties of ferromagnetic materials is their magnetostrictive property, which is well visible in galfenol alloy. Therefore, this alloy can be used in the manufacture of magnetoelectric sensors. The best way to build these types of sensors is to simulate them to optimize the structure and layering. In this paper, we simulated the magnetization diagram and magnetization saturation of galfenol alloy with Comsol software. The material is saturated in a magnetic field of 15 mT. Also in the range of 4 mT, it has the highest slope for magnetization changes. Also, the magneto-mechanical coupling of 0.76 makes this alloy suitable for making magnetoelectric sensors.

Keywords: *Saturation Magnetization, Magnetostriction, Magnetic Sensors, Galfenol*

PACS: 75.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مقدمه

در سالیان گذشته، کاربرد مواد مغناطیسی در حوزه های مختلف صنعتی افزایش چشم گیری داشته است. در همین راستا، طراحی، آماده سازی و شناسایی مواد مغناطیسی یکی از مهمترین مباحث فیزیک به شمار می آید. یکی از اصلی ترین روش های دسته بندی مواد مغناطیسی طبق پاسخگویی آنها به یک میدان مغناطیسی خارجی است. بر این اساس مواد مغناطیسی را می توان به فازهای پارامغناطیس، فرومغناطیس، آنتی فرومغناطیس، دیامغناطیس و فری مغناطیس تقسیم بندی کرد[۱و۲].

فرومغناطیس موادی هستند که مغناطش خودبخودی دارند و این مغناطش را می توان با استفاده از میدان مغناطیسی کنترل کرد. این مواد با توجه به خواص منحصر به فرد دارای پتانسیل بالایی برای ساخت حسگرها، محرک ها، مبدلها و سیستم های میکروالکترومکانیکی هستند. مواد زیادی در این زمینه وجود دارند که معروفترین آنها عناصر آهن، نیکل، کبالت و آلیاژهای ساخته شده توسط این مواد می باشند[۳و٤].

یکی از خواص مواد مغناطیسی که در فاز فرومغناطیس درصد بزرگتری نسبت به بقیه مواد دارد، خاصیت مغناطوتنگش می باشد. مغناطوتنگش یک اثر جفت کننده بین انرژی مغناطیسی و انرژی مکانیکی است. طبق این خاصیت، بر اثر اعمال میدان مغناطیسی تنشی به ماده مغناطیسی اعمال شده و باعث تغییر طول یا حجم آن می شود. حالت مغناطیسی به فاصله بین اتم های مغناطیسی و یون ها بستگی دارد، در نتیجه در اثر تغییر در وضعیت مغناطیسی با استفاده از یک میدان مغناطیسی خارجی، تنش کشسان و یا عوامل دیگر، اتم ها نسبت به حالت تعادلشان جابجا می شوند که این امر باعث به وجود آمدن خاصیت مغناطوتنگش یا تنگش مغناطیسی می شود. این خاصیت تا رسیدن مواد مغناطیسی به مغناطش اشباع دیده می شود و بعد از آن تغییری در مقدار مغناطوتنگشی ماده ایجاد نمی شود. مغناطش اشباع حالتی است که در آن با افزایش شدت میدان مغناطیسی خارجی، چگالی مغناطیسی به میزان کمی افزایش یافته و تقریبا ثابت می ماند[۵و٦].

یکی از بهترین موادی که خاصیت مغناطوتنگشی از خود نشان می دهد آلیاژ گالفنول می باشد. آلیاژ گالفنول به آلیاژ آهن و گالیوم با ساختار Fe_xGa_{1-x} اطلاق می شود. افزودن گالیوم به آهن می تواند اثر مغناطیسی آهن را تا ده برابر افزایش دهد. گالیوم ساختار منظم اتم های آهن را از سلول های مکعبی منظم به سلولی تغییر می دهد که در آن وجه های برخی از سلول ها کمی مستطیل شکل می شود. این ماده مورد توجه محققان سونار است زیرا از مواد مغناطیسی برای تشخیص صدا استفاده می شود و تقویت اثر مغناطیسی می تواند منجر به حساسیت بهتر آشکارسازهای سونار شود. همچنین برای برداشت انرژی ارتعاشی، عملگرها، سیستم‌های ضد لرزش فعال و حسگرهای مغناطیسی بر پایه اثر مغناطوالکتریک می توان از این آلیاژ استفاده کرد[۷و۸].

با بدست آوردن اشباع مغناطیسی می توان حسگرهایی بر پایه خاصیت مغناطوتنگش مانند حسگرهای مغناطوالکتریک با توانایی حسگری پیکوتسلا طراحی کرد[۹]. از آنجایی که ساخت و بررسی این حسگرها با تمام مواد موجود و همه ساختارهای ممکن فرآیندی پر هزینه و زمان بر می باشد، در نتیجه شبیه سازی این نوع حسگرها از لحاظ مهندسی سازه، لایه نشانی، عملکرد در جفت شدگیهای مختلف مانند جفت شدگی با مواد فروالکتریک و فروالاستیک برای بدست آوردن یک حسگر بهینه اهمیت بسزایی دارد. شرط اول این نوع شبیه سازی ها، بدست آوردن نمودار مغناطش ماده و در نتیجه مغناطش اشباع آنها می باشد.

از این رو ما در این پژوهش مغناطش آلیاژ گالفنول را به منظور استفاده در حسگرهای مغناطیسی با استفاده از نرم افزار کامسول شبیه سازی کردیم. این ماده از بهترین مواد مغناطوتنگش محسوب می شود که قابل ماشینکاری بوده و در سیستم های میکروالکترومکانیکی می تواند کاربرد فراوانی داشته باشد. آلیاژ گالفنولی که در این مقاله شبیه سازی شده است دارای ساختار $Fe_{0.83}Ga_{0.17}$ می باشد.در ساختارهای گالفنول، با افزایش درصد گالیوم مدول یانگ کاهش می

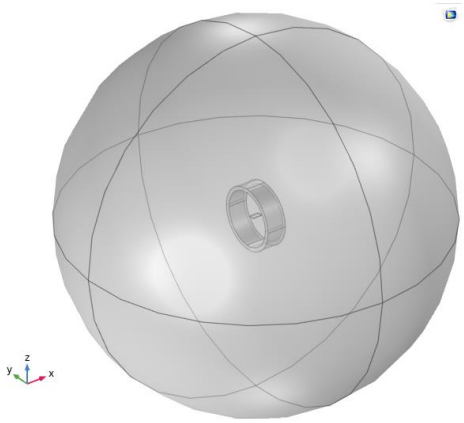
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

یابد. از طرفی ساختار $Fe_{0.83}Ga_{0.17}$ نسبت به ساختارهای دیگر از این آلیاژ دارای ثابت مغناطوتنگش بیشتر و نقطه ماکزیمم بوده و مغناطش اشباع بیشتری نیز دارد[۱۰و۱۱].

شبیه سازی

نرم افزار چند فیزیکی کامسول برای شبیه سازی قسمت های مختلف و ایجاد یک مدل سه بعدی مورد استفاده قرار گرفت. مدل شبیه سازی شده شامل آلیاژ گالفنول به عنوان ماده مغناطوتنگش، سیم پیچ برای ایجاد میدان مغناطیسی و یک جعبه هوا می باشد که در شکل ۱ نشان داده شده است.

برای ارائه یک محیط طبیعی و یک مرز محدود برای شبیه سازی، یک جعبه هوا تعریف می کنیم، میدان مغناطیسی اعمال شده به ماده داخل این جعبه هوا ایجاد شده است.



شکل ۱: مدل سه بعدی از سیم پیچ، جعبه هوا و نمونه اندازه گیری شده

با استفاده از ماژول های مکانیک جامدات و میدان های مغناطیسی در نرم افزار کامسول، بقیه شبیه سازی انجام گرفت. ۲۰۰ میلی گرم آلیاژ گالفنول برای بدست آوردن نمودار اشباع مغناطیسی استفاده گردید. سیم پیچ دارای شعاع ۳ سانتی متر بوده و ۵۰۰ دور سیم از جنس مس با سطح مقطع سیم $1\ \mu m^2$ بوده و جریان الکتریکی I در آن جاری است. جریان الکتریکی I از صفر تا مقداری که میدان مغناطیسی لازم برای به اشباع رساندن ماده نیاز باشد افزایش می یابد. میدان مغناطیسی ایجاد شده درون سیم پیچ به شعاع R از رابطه ۱ پیروی می کند که در آن B میدان مغناطیسی تولید شده، I جریان الکتریکی، N تعداد دور سیم پیچیده شده در سیم پیچ و μ ضریب نفوذپذیری مغناطیسی می باشد. این رابطه میدان تولید شده توسط سیم پیچ را نشان می دهد.

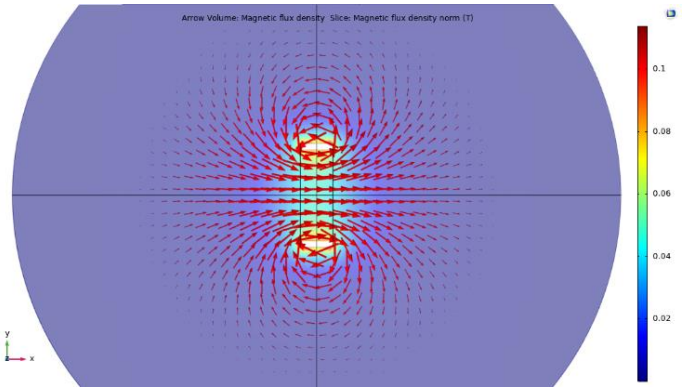
$$B=\frac{\mu_0 NI}{2R} \qquad (۱)$$

روش المان محدود (FEM) یک تکنیک مورد علاقه برای حل عددی معادلات دیفرانسیل هر پدیده فیزیکی از طریق مدل سازی ریاضی است. این روش نیاز به گسسته سازی دامنه دارد که با مش بندی آن انجام می شود. مش بندی که برای شبیه سازی در کامسول انتخاب می کنیم به شدت بر نیازهای مدل سازی تأثیر می گذارد. در حقیقت، مش بندی یکی از مهم ترین مراحل برای حل مسئله المان محدود است و بهینه سازی توزیع آن در شبیه سازی ها می تواند دقت محاسبات را افزایش دهد.

در این شبیه سازی مش بندی انجام گرفته به گونه ای هست که در مناطقی مانند لبه ها، توزیع مش بیشتری وجود دارد. بخاطر وجود خاصیت مغناطوتنگش و تغییر طول یا حجم ماده، مش بندی در لبه ها و سطوح بیرونی نسبت به سایر نواحی ریزتر می باشد.

نتیجه گیری

با اجرای شبیه سازی در نرم افزار کامسول، ابتدا میدان مغناطیسی تولید شده توسط سیم پیچ بدست آمد. در شکل ۲ میدان مغناطیسی ایجاد شده توسط سیم پیچ به صورت دو بعدی و برش از بالا مشاهده می شود.

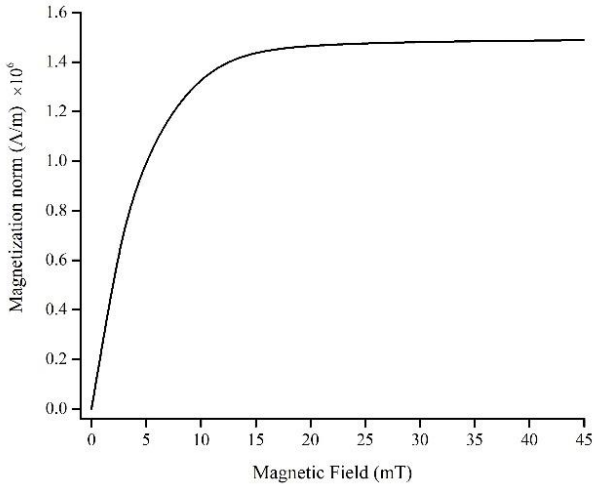


شکل ۲: تصویری از میدان مغناطیسی تولید شده توسط سیم پیچ در صفحه XY

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

در این تصویر میدان مغناطیسی ۵۰ mT که توسط سیم پیچ تولید شده و بصورت یکنواخت به آلیاژ گالفنول اعمال شده است قابل مشاهده است.

برای محاسبه نمودار مغناطش، میدان مغناطیسی از مقدار صفر تا ۵۰ mT در گام های ۱ mT جاروب شده است. با افزایش جریان الکتریکی و در نتیجه افزایش میدان مغناطیسی، ماده به سمت مغناطش اشباع رفته و در میدان مغناطیسی ۱۵ mT به اشباع مغناطیسی می رسد. همچنین نمودار مغناطش گالفنول در محدوده ٤ mT دارای بیشترین شیب می باشد که نشان دهنده حساسیت زیاد این ماده به میدان مغناطیسی در این محدوده است که برای ساخت انواع حسگرهای مغناطیسی مانند حسگرهای مغناطوالکتریک که توانایی حسگری میدان مغناطیسی در محدوده پیکوتسلا را داراست مناسب می باشد، در واقع این ماده برای کاربرد حسگری نیازمند میدان بایاس مغناطیسی کمتر نسبت به اکثر مواد بوده (٤ mT) و ایجاد این میدان مغناطیسی راحت می باشد. همچنین دارای ضریب مغناطوتنگش بالایی می باشد. این دو نکته باعث می شود که این ماده مناسب برای ساخت حسگرهای مغناطیسی باشد.



شکل ۳: نمودار مغناطش آلیاژ گالفنول توسط شبیه سازی با نرم افزار کامسول

با توجه به نمودار مغناطش بدست آمده از آلیاژ گالفنول با ساختار $Fe_{0.83}Ga_{0.17}$ (شکل ۳)، اشباع مغناطیسی این ماده نیازمند میدان مغناطیسی با مقدار بالا نمی باشد، همچنین این ماده دارای خاصیت مغناطوتنگشی بالایی نیز می باشد. ضریب جفت شدگی مغناطومکانیکی برای این آلیاژ در حدود ۰,۷٦ است، درنتیجه می توان از این ماده برای تبدیل انرژی مغناطیسی به انرژی مکانیکی استفاده کرد[۱۰و۱۲]. با توجه به شبیه سازی صورت گرفته، می توان برای ساخت انواع حسگرها و قطعات مغناطیسی که نیازمند نمودار مغناطش است از این روش استفاده نمود که باعث صرفه جویی در هزینه و زمان می شود.

معادل انگلیسی کلمات

مغناطوتنگش = Magnetostriction ، آلیاژ گالفنول = Galfenol alloy ، مدول یانگ = Young's modulus

روش المان محدود = Finite Element Method

مرجع‌ها

[۱] Jiles, David; "*Introduction to magnetism and magnetic materials*"; 3rd edition, Boca Raton (2015).

[۲] H.Szymczak; "*Magnetic Materials and Applications*", Encyclopedia of Condensed Matter Physics; Polish academy of sciences, Warsaw (2005).

[۳] Anuj Kumar and Davinder Kaur; "AlScN-based MEMS magnetoelectric sensor"; *Applied Physics Letters* **117**, 132903 (2020).

[٤] Chikazumi, Sōshin; "*Physics of ferromagnetism*"; 2ed edition, Oxford University Press; (2009).

[٥] Anuj Kumar, Davinder Kaur; " Magnetoelectric heterostructures for next-generation MEMS magnetic field sensing applications"; *Journal of Alloys and Compounds* **897**; 163091 (2022).

[٦] Gang Yang; "*Contribution to modelling of magnetoelectric composites for energy harvesting*"; Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, (2016).

[۷] ValerioApicellaa, Carmine StefanoClemente, et al; "Analysis and Modeling of a passive force sensor based on Villari effect"; *Mathematics and Computers in Simulation* **183**; (2021).

[۸] AbhishekKumar and VeeraSundararaghavan; "Simulation of magnetostrictive properties of Galfenol under thermomechanical deformation"; *Finite Elements in Analysis and Design* **127**; (2017).

[۹] Mahesh Peddigari, Kyoohee Woo, et al; " Ultra-magnetic field sensitive magnetoelectric composite with sub-pT detection limit at low frequency enabled by flash photon annealing"; *Nano Energy* **90**; 106598 (2021).

[۱۰] S. Datta, et al; "Figures of merit of magnetostrictive single crystal iron–gallium alloys for actuator and sensor applications"; *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **321**, (2009).

[۱۱] Holly Marie Schurter; "EXPERIMENTAL INVESTIGATION OF THE MECHANICAL PROPERTIES AND AUXETIC BEHAVIOR OF IRON-GALLIUM ALLOYS", Thesis submitted to the Faculty of the Graduate School of the University of Maryland, USA, (2009).

[۱۲] Qian Zhang; "*Experimental Characterization of Galfenol (FeGa) Alloys*" The Ohio State University, USA, (2014)

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

اثر جانشانی آلومینیوم بر خواص ساختاری نانوذرات فریت نیکل

حدادی، حسین؛ سرحدی، رضا؛ حضرتی سعدآبادی، مرضیه

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه بیرجند، بیرجند

چکیده

در این تحقیق، نانوذرات فریت-نیکل آلومینیوم $NiFe_{2-x}Al_xO_4$ (۱، ۰/۷۵، ۰/۵، ۰/۲۵، ۰ = x) با استفاده از روش سل-ژل خود احتراقی تهیه و توسط آنالیز حرارتی همزمان (STA)، پراش‌سنج پرتو ایکس (XRD)، میکروسکوپ الکترونی روبشی انتشار میدانی (FESEM)، طیف‌سنج‌های مادون قرمز (FTIR) و رامان مشخصه یابی شده‌اند. نتایج آنالیز XRD، شکل‌گیری فاز اسپینل مکعبی را برای تمامی نمونه‌ها نشان می‌دهد. اندازه بلورک و پارامتر شبکه با افزایش مقدار آلومینیوم کاهش و مقدار کرنش افزایش می‌یابد. مشخصه‌یابی‌های FTIR و Raman نیز تشکیل ساختار اسپینل فریت نیکل را با جانشانی یون‌های آلومینیوم تایید می‌کند.

واژه های کلیدی: *فریت نیکل، جانشانی آلومینیوم، سل-ژل خود احتراقی، مشخصه‌یابی ساختاری*

Effect of aluminum substitution on the structural properties of nickel ferrite nanoparticles

Haddadi, Hossein; Sarhaddi, Reza; Hazrati Saadabadi, Marzieh

Department of Physics, Faculty of Sciences, University of Birjand, Birjand

Abstract

In this research, nickel-aluminum ferrite nanoparticles $NiFe_{2-x}Al_xO_4$ (x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1) were synthesized by the sol-gel auto-combustion method and have been characterized by simultaneous thermal analysis (STA), X-ray diffractometer (XRD), field emission scanning electron microscope (FESEM), fourier transform infrared (FTIR) and Raman spectrometers. The results of XRD analysis show the formation of a cubic spinel phase for all samples. The crystallite size and lattice parameter decrease with increasing nickel content whereas micro-strain increases. FTIR and Raman characterizations also confirm the spinel phase formation of nickel ferrite with aluminum substitution.

***Keywords**: Nickel ferrite, Aluminum substitution, Sol-gel auto-combustion, Structural characterization*

PACS No. 75, 81

مقدمه

فریت نیکل با ترکیب $NiFe_2O_4$ از جمله سرامیک‌های مغناطیسی با ساختار اسپینل است که به دلیل مقاومت الکتریکی بسیار بالا و تلفات مغناطیسی اندک، کاربرد فراوانی را در صنعت الکترونیک و پزشکی به خود اختصاص داده است [۱]. فریت نیکل، دارای ساختار اسپینل معکوس است که در آن یون‌های Fe^{3+} به طور مساوی در مکان‌های چهار وجهی و هشت وجهی تقسیم شده و یون‌های Ni^{2+} در مکان‌های هشت وجهی قرار می‌گیرند. هدف از جانشانی یون Al^{3+} در این پژوهش، افزایش مقاومت الکتریکی و در نتیجه کاهش اتلاف دی الکتریکی فریت نیکل همزمان با کاهش مغناطش اشباع آن بوده که فریت نیکل را برای استفاده در هسته ترانسفورماتورها و مواد جذب امواج راداری، مناسب می‌سازد. روش‌های ساخت متعددی برای سنتز نانوذرات فریت نیکل گزارش شده است [۲]. در این مطالعه، از روش سل-ژل خوداحتراقی برای ساخت نانوذرات فریت نیکل آلائیده شده با آلومینیوم استفاده و خواص ساختاری آن‌ها بررسی شده است.

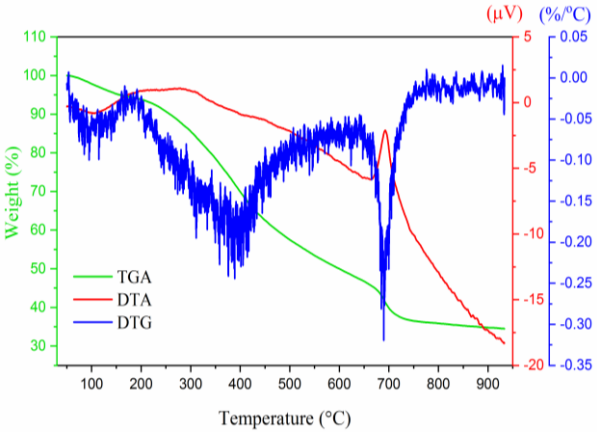
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بخش تجربی

برای ساخت نانوذرات فریت نیکل-آلومینیوم با فرمول $NiFe_{2-x}Al_xO_4$ (x = ۰، ۰/۲۵، ۰/۵، ۰/۷۵، ۱) از نیترات‌های آبدار فلزات نیکل $Ni(NO_3)_2.6H_2O$، آهن $Fe(NO_3)_3.9H_2O$، آلومینیوم $Al(NO_3)_3.9H_2O$ (با درجه خلوص ۹۹٪ محصول شرکت مرک آلمان) به عنوان مواد اولیه، استفاده شد. ابتدا مقادیر لازم از نیترات‌های فلزی در ۱۰۰ سی سی آب دیونیزه حل شدند. سپس، اسید سیتریک ($C_6H_8O_7$) با نسبت مولی ۳ برابر مجموع نیترات‌های فلزی به محلول اضافه شد. در ادامه، برای اینکه pH محلول خنثی بماند، مقداری آمونیاک (۳۵٪ محصول شرکت مرک آلمان) به محلول اضافه می‌کنیم. برای انجام واکنش‌ها، محلول با یک همزن مغناطیسی در دمای ۸۰ °C همزده شد. سپس ژل به دست آمده را در درون آون با دمای ۲۲۰ °C می‌گذاریم تا احتراق خود به خودی صورت گیرد. ژل خشک شده را آسیاب کرده و در داخل کوره در دمای ۸۰۰ °C با نرخ حرارتی ۳ °C/min به مدت ۲ ساعت گرما می‌دهیم.

نتایج و بحث

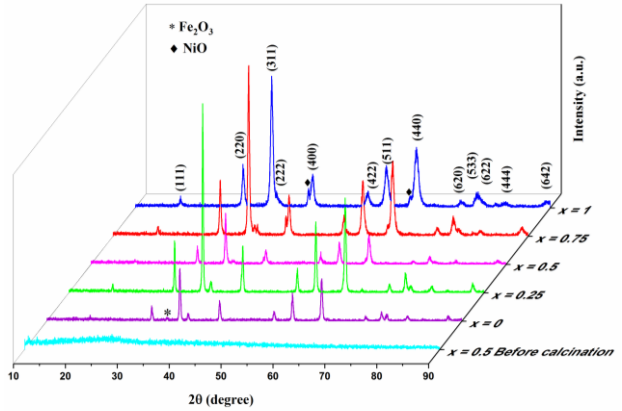
برای بررسی دمای تشکیل فاز بلوری فریت نیکل-آلومینیوم، آنالیز حرارتی ژل خشک شده مربوط به نمونه $NiFe_{1.5}Al_{0.5}O_4$ (x=0.5) با دستگاه آنالیز حرارتی همزمان (STA) با سرعت حرارت دهی ۱۰ °C/min، در محیط هوا انجام شد. منحنی‌های TGA، DTG و DTA نمونه، در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱: منحنی TGA، DTA و DTG نمونه $NiFe_{1.5}Al_{0.5}O_4$

در منحنی TGA، سه مرحله کاهش جرم مشاهده می‌شود. اولین مرحله کاهش جرم، در محدوده دمایی ۱۶۵-۲۵ درجه سانتی‌گراد متناظر با یک پیک گرماگیر پهن در اطراف ۱۰۰ درجه سانتی‌گراد در منحنی DTA به دلیل تبخیر آب باقی مانده در ژل می‌باشد. دومین مرحله کاهش جرم، در بازه دمایی ۷۴۰-۱۶۵ درجه سانتی‌گراد مربوط به تجزیه شیمیایی ژل خشک شده می‌باشد. پیک گرمازای تیز مشاهده شده در دمای ۶۸۰ درجه سانتی‌گراد در منحنی DTA، مربوط به تبلور نمونه $NiFe_{1.5}Al_{0.5}O_4$ می‌باشد. تقریبا هیچ کاهش جرمی در دمای بالای ۶۸۰ درجه سانتی‌گراد مشاهده نمی‌شود که نشان دهنده کامل شدن فرآیند تجزیه حرارتی و شکل‌گیری فاز بلوری فریت است. با این وجود، دمای تکلیس را برای تمامی نمونه‌ها، ۸۰۰ درجه سانتی‌گراد انتخاب کردیم تا از شکل‌گیری فاز اسپینلی برای تمامی نمونه‌ها اطمینان حاصل شود.

در شکل ۲، الگوی پراش اشعه ایکس (XRD) نمونه‌ها نشان داده شده است.



شکل ۲: الگوی XRD نانوذرات $NiFe_{2-x}Al_xO_4$

تحلیل پیک‌های ظاهر شده با استفاده از نرم افزار X'Pert Plus نشان می‌دهد الگوی پراش اصلی تمامی نمونه‌ها با شماره کارت استاندارد ۰۰-۰۱۰-۰۳۲۵ مطابقت دارد. از این رو ساختار بلوری غالب نانوذرات، اسپینل مکعبی است (با گروه فضایی Fd3m). در نمونه x = ۰ علاوه بر فاز $NiFe_2O_4$ یک پیک کوچک مربوط به فاز Fe_2O_3 هم ظاهر شده که با شماره کارت ۰۱-۰۸۰-۲۳۷۷ همخوانی دارد. با افزودن یون آلومینیوم در نمونه x = ۰/۲۵، قله‌های مربوط به Fe_2O_3 از بین می‌رود. برای مقادیر x بیشتر از ۰/۵، علاوه بر فاز $NiFe_2O_4$، فاز NiO (اکسید نیکل) هم ظاهر شده

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

است (شماره کارت استاندارد ۱۰۴۹-۴۷-۰۰). علاوه بر این موارد، الگوی XRD مربوط به نمونه x = ۰/۵ بدون کلسینه (ژل خشک شده)، طبیعت کاملاً آمورف را نشان می‌دهد در حالیکه، نمونه متناظر تکلیس شده، دارای فاز بلوری اسپینلی بوده که تاثیر دما بر بلورینگی را به درستی نشان می‌دهد. ضمناً با افزایش مقدار آلومینیوم، قله‌ها پهن‌تر شده و تعدادی از قله‌های ضعیف نیز از بین می‌رود. همچنین محل قله‌ها به سمت زوایای بزرگتر، جابجا می‌شوند.

برای تخمین اندازه بلورک (D) از رابطه ویلیامسون-هال (رابطه ۱) استفاده شده است:

$$\beta\cos\theta = \frac{K\lambda}{D} + 4\varepsilon\sin\theta \qquad (۱)$$

که در این رابطه، K فاکتور تصحیح است که برای ساختار مکعبی ۰/۹۴ می‌باشد، λ طول موج اشعه x برابر با ۱/۵۴۰۶ آنگستروم، β پهنای پیک ماکزیمم در نصف ارتفاع (FWHM) بر حسب رادیان، D اندازه بلورک‌ها و ε بیانگر کرنش است. با رسم نمودار βcosθ بر حسب 4sinθ و برازش خطی آن، می‌توان ε و D را محاسبه کرد بطوریکه، شیب خط مقدار کرنش را می‌دهد و با استفاده از عرض از مبدا، می‌توان D را محاسبه کرد. اندازه بلورک‌ها و کرنش بدست آمده با روش ویلیامسون-هال در جدول ۱ آورده شده است.

جدول ۱: ثابت شبکه، اندازه بلورک و کرنش نانوذرات $NiFe_{2-x}Al_xO_4$

x	a (Å)	D (nm)	ε (%)
۰	۸/۳۴۱	۴۶/۳	۰/۰۹
۰/۲۵	۸/۳۱۲	۴۴/۶	۰/۱۷
۰/۵	۸/۲۶۷	۴۲/۷	۰/۲۱
۰/۷۵	۸/۲۴۴	۳۱/۷	۰/۲۲
۱	۸/۲۰۶	۲۶/۹	۰/۴

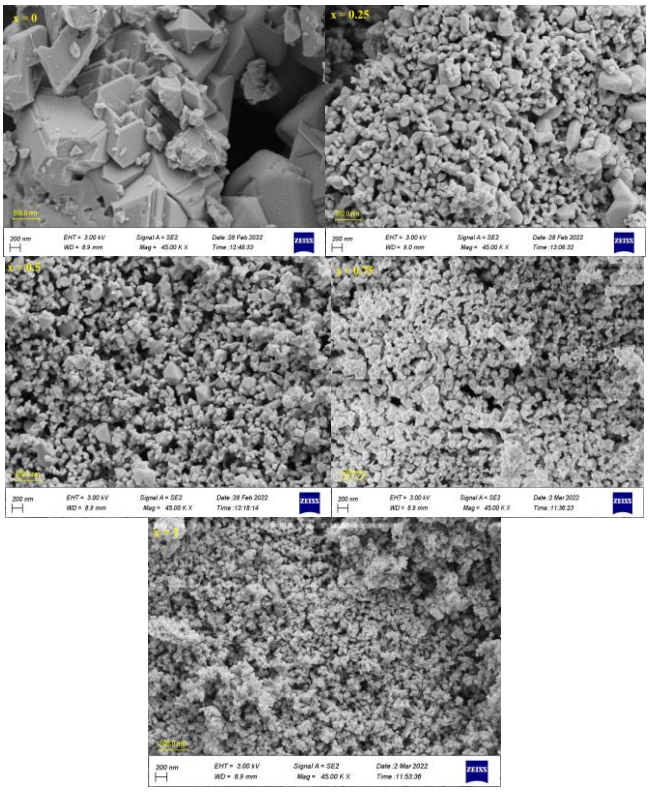
همانطور که مشاهده می‌شود اندازه بلورک‌ها با افزایش مقدار یون آلومینیوم، به طور پیوسته کاهش می‌یابد که ناشی از افزایش کرنش در نمونه‌ها به دلیل تفاوت شعاعی یونی یون‌های Al^{3+} و Fe^{3+} است.

برای بدست آوردن مقدار دقیق ثابت شبکه بلوری نانوذرات، از تابع برون‌یابی نلسون-ریلی (رابطه ۲) استفاده شده است:

$$F(\theta) = 0.5\left(\frac{\cos^2\theta}{\sin\theta} + \frac{\cos^2\theta}{\theta}\right) \qquad (۲)$$

که در این رابطه، θ برحسب رادیان می باشد. برای این منظور، منحنی F(θ) برای مقادیر مختلف ثابت شبکه بدست آمده برای کلیه قله‌های داخل الگوی پراش اشعه ایکس هر نمونه رسم شده و به صورت خطی، برازش داده می‌شود. عرض از مبدا حاصل از برازش، ثابت شبکه دقیق ساختار بلوری ترکیب را بدست می‌دهد. ثابت شبکه بدست آمده برای نانوذرات، در جدول ۱ نشان داده شده است. مقدار ثابت شبکه نانوذرات، با افزایش جانشانی یون Al^{3+}، کاهش می‌یابد که به دلیل تفاوت شعاع یونی آلومینیوم و آهن می‌باشد (r_{Fe}^{3+}=0.67 Å و r_{Al}^{3+}=0.56 Å).

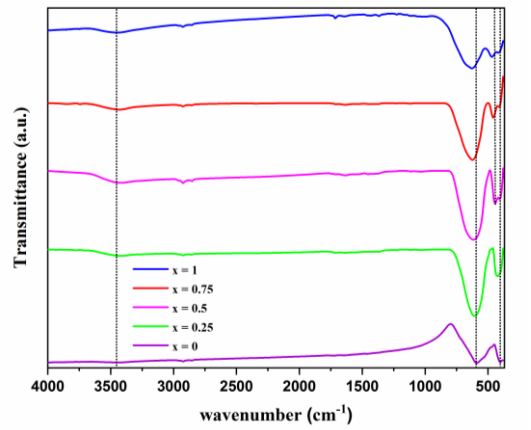
تصاویر آنالیز FESEM نانوذرات، در شکل ۳ نشان داده شده است. اثر جانشانی یون Al^{3+} بر ریخت‌شناسی و اندازه نانوذرات فریت نیکل را می‌توان با مقایسه تصاویر دریافت. همانطور که مشاهده می‌شود با افزایش آلومینیوم، اندازه ذرات به طور پیوسته کاهش یافته و تخلخل نمونه‌ها افزایش می‌یابد.



شکل ۳: تصاویر FESEM نانوذرات $NiFe_{2-x}Al_xO_4$

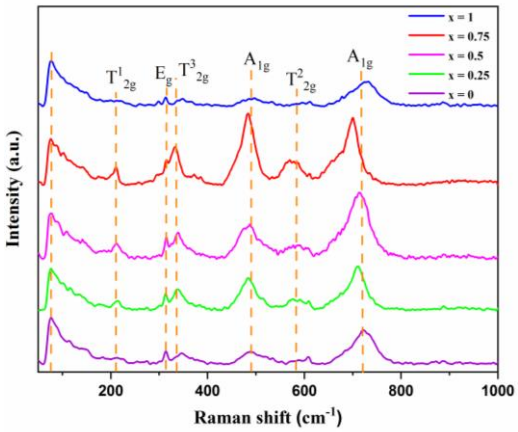
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

طیف FTIR نانوذرات $NiFe_{2-x}Al_xO_4$ (۱، ۰/۷۵، ۰/۵، ۰/۲۵، ۰ = x)، در شکل ٤ نشان داده شده است. قله‌های جذب ظاهر شده در طیف FTIR، مربوط به ارتعاشات کششی یون‌های فلزی در شبکه فریت اسپینل است. فریت اسپینل دارای قله‌های مشخصه مربوط به جایگاه‌های چهاروجهی و هشت وجهی است. قله cm^{-1} ۵۹۳ مربوط به ارتعاشات کششی ذاتی فلز در موقعیت چهاروجهی (Fe/Al-O) است. قله‌های cm^{-1} ٤۰۷ و cm^{-1} ٤٦۹ نیز به ارتعاشات کششی فلز در مکان‌های هشت وجهی (Ni-O) اختصاص دارد. تفاوت موقعیت جذب در مکان‌های هشت وجهی و چهاروجهی بلوری $NiFe_{2-x}Al_xO_4$ با افزایش مقدار آلومینیوم، به دلیل فاصله متفاوت Fe^{3+}/Al^{3+}-O^{2-} در موقعیت‌های هشت وجهی و چهاروجهی است. قله پهن در محدوده cm^{-1} ۳٤٦٤ به حالت‌های ارتعاش کششی و خمشی (H-O-H) آب آزاد یا جذب شده توسط نانوذرات نسبت داده می‌شود [۳].



شکل ٤: طیف FTIR نانوذرات $NiFe_{2-x}Al_xO_4$

شکل ۵، طیف رامان نمونه‌ها در محدوده cm^{-1} ۵۰-۱۰۰۰ را نشان می‌دهد. دو باند قوی در محدوده cm^{-1} ٤۹۰ و cm^{-1} ۷۲۰ به ترتیب به موقعیت‌های چهاروجهی (Fe^{3+} در A) و هشت وجهی (Fe^{3+} و Ni^{2+} در B) در ساختار اسپینل معکوس فریت‌ها با فرمول استکیومتری AB_2O_4 اختصاص دارند. همانطور که مشاهده می‌شود هر دو باند با افزایش بون Al به سمت عدد موج پایین‌تر جابجا می‌شوند. این مطلب، موید وجود کرنش بیشتر در نانو ذرات آلائیده شده با Al است که با مقادیر کرنش بدست آمده از آنالیز XRD، مطابقت دارد. مد A_{1g} به حالت کششی متقارن ارتعاش در موقعیت چهاروجهی مرتبط است. همچنین مد T^1_{2g} به دلیل خمش پادمتقارن اکسیژن نسبت به آهن، مد T^2_{2g} کشش پاد متقارن آهن و اکسیژن، مد T^3_{2g} به دلیل حرکت پیچشی Fe-O و مد E_g مربوط به خمش متقارن یون اکسیژن نسبت به یون آهن می‌باشد [٤].



شکل ۵: طیف رامان نانوذرات $NiFe_{2-x}Al_xO_4$

نتیجه‌گیری

در این پژوهش نانوذرات فریت نیکل-آلومینیوم به روش سل-ژل خود احتراقی ساخته شد. نتایج آنالیز حرارتی شکل‌گیری فاز بلوری در دماهای بالاتر از °C ٦۸۰ را نشان می‌دهد. نتایج XRD، شکل‌گیری ساختار اسپینلی مکعبی را برای همه نمونه‌ها نشان می‌دهد. مقادیر ثابت شبکه و اندازه بلورک با افزایش آلومینیوم کاهش و مقدار کرنش افزایش می‌یابد. تغییر موقعیت قله‌های جذب در طیف FTIR و همچنین باندهای قوی در طیف Raman، جانشانی موفق یون‌های آلومینیوم در ساختار بلوری فریت نیکل را تایید می‌کند.

مرجع‌ها

[۱] Nejati, K., & Zabihi, R. (2012). Preparation and magnetic properties of nano size nickel ferrite particles using hydrothermal method. *Chemistry Central Journal*, *6*(1), 1-6.

[۲] Zhang, Z., Yao, G., Zhang, X., Ma, J., & Lin, H. (2015). Synthesis and characterization of nickel ferrite nanoparticles via planetary ball milling assisted solid-state reaction. *Ceramics International*, *41*(3), 4523-4530.

[۳] Sivakumar, P., Ramesh, R., Ramanand, A., Ponnusamy, S., & Muthamizhchelvan, C. (2013). Synthesis and characterization of NiFe2O4 nanoparticles and nanorods. *Journal of Alloys and Compounds*, *563*, 6-11.

[٤] Kamble, R. B., Varade, V., Ramesh, K. P., & Prasad, V. (2015). Domain size correlated magnetic properties and electrical impedance of size dependent nickel ferrite nanoparticles. *AIP Advances*, *5*(1), 017119.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

اثر بکارگیری اکسیدگرافن در فوتوترمال تراپی سرطان دهانه رحم: اثر حرارتی و ارزیابی سمیت

زارع مهرآبادی، فرزانه[۱] ؛ حداد، محمدعلی[۲و۱] ؛ حسینی‌مطلق، نجمه‌السادات[۳] ؛ عباس بهجت[۲و۱]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه یزد، صفائیه، بلوار دانشگاه، یزد

[۲] گروه پژوهشی فوتونیک، آزمایشگاه تحقیقاتی بیناب نگاری لیزری، دانشگاه یزد، صفائیه، بلوار دانشگاه، یزد

[۳] گروه مهندسی پزشکی، دانشگاه میبد، یزد-میبد

چکیده

در این مقاله به منظور مطالعه فرایند فوتوترمال تراپی در درمان سلول‌های سرطانی دهانه رحم، اثرتابش‌دهی پرتو لیزر بر محلول اکسیدگرافن با غلظت‌های مختلف مورد بررسی قرار گرفته شد. نشان داده شده است که تغییرات دمای محلول اکسید گرافن در طول موج‌های با تابش پیوسته و منقطع زمانی برای رسیدن به دمای مطلوب مرگ سلول‌های سرطانی موثر است. همچنین میزان سمیت محلول اکسیدگرافن بر روی سلول‌های سرطانی دهانه رحم در بازه زمانی ۴۸-۲۴ ساعت مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان می‌دهد که در زنده‌مانی سلول‌های سرطانی دهانه رحم، زمان و غلظت نانوذرات تاثیر گذار است و همچنین در انتقال گرما، افزایش دما با افزایش غلظت نانوذرات، زمان تابش‌دهی و توان لیزر رابطه مستقیم دارد.

واژه های کلیدی: *اکسیدگرافن، سرطان دهانه رحم، فوتوترمال تراپی، لیزر، نانوذرات*

The effect of using graphene oxide in photothermal therapy of cervical cancer: thermal effect and toxicity assessment

Zare Mehrabadi, Farzaneh[1]; Haddad, Mohammad Ali[1&2] ; Hosseini Motlagh, Najmeh Sadat[3] ; Behjat, Abbas[1&2]

[1] Department of Physics, Yazd University, Yazd, Iran
[2]Photonic Research Group, Laser Spectroscopy Research Laboratory, Yazd University, Yazd, Iran
[3]Department of Biomedical engineering, Meybod University, Meybod, Iran

Abstract

In this article, the effect of laser beam irradiation on different concentrations of graphene oxide solution was studied in order to evaluate the process of photothermal therapy in the treatment of cervical cancer cells. Variations in graphene oxide solution temperature as a result of continuous wave and chopped laser radiation have been found to be effective for reaching the optimal temperature for cancer cell death. Furthermore, the toxicity of graphene oxide solution on cervical cancer cells was evaluated within 24 to 48 hours. The results indicate that the nanoparticle concentration and duration of exposure affect the survival of cervical cancer cells, and that in heat transfer, the increase in temperature is proportional to the increase in nanoparticle concentration, exposure time, and laser power.

***Keywords**: Graphene oxide, Cervical cancer, Laser, Nanoparticles, Photothermal therapy*

PACS No. 81 & 87

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مقدمه

سرطان یکی از علل اصلی مرگ و میر انسان‌ها است که هرساله آمار مرگ و میر آن رو به افزایش است و به عنوان یکی از چالش‌های بزرگ برای سلامت انسان در سراسر جهان است. متاسفانه روش‌های درمان رایج فعلی عوارض جانبی بالایی دارند که تحمل و کارایی بالینی آن‌ها را محدود می‌کند[۱]. در نتیجه روش‌های جایگزین از این جهت مورد توجه قرار گرفتند که عوارض جانبی پایین و آسیب کمتری بر روی بافت‌های سالم دارند.

سرطان دهانه رحم چهارمین سرطان شایع در زنان، که میزان مرگ و میر ناشی از آن در مناطق کمتر توسعه یافته جهان به ۸۵٪ می‌رسد[۲] و این اهمیت رسیدگی به این بیماری را نشان می‌دهد از همین جهت از رده سلول‌های سرطانی HeLa (سلول‌های سرطانی دهانه رحم) در این پژوهش استفاده شده است.

نظریه استفاده از گرما در دراز مدت به عنوان یک روش جایگزیده در مقایسه با روش‌های رایج مورد توجه بوده اما رسیدن به دمای مطلوب برای مرگ سلول‌های سرطانی به طوری که بافت‌های سالم منجر به آسیب نشوند یک چالش بزرگ در این زمینه است.

با کشف لیزر روزنه‌هایی از امید برای حل این مشکل ایجاد شد اما مشکل عمده استفاده از لیزر غیرانتخابی بودن آن می‌باشد چرا که بافت سرطانی و سالم هر دو در مسیر تابش لیزر دچار آسیب خواهند شد، از طرفی دیگر نیاز به چگالی توان بالا برای از بین بردن تومورها یکی دیگر از چالش‌هایی است که از آن می‌توان یاد کرد[۳].

در این میان نانوذرات برای پر کردن این خلاءها پا به عرصه گذاشتند که در تقویت روش فوتوترمال نقش به سزایی دارند زیرا انتخابی بودن روش فوتوترمال تراپی[۱] و کاربرد آن در توان‌های پایین را ممکن ساخته‌اند. به علاوه ویژگی‌های دیگری همچون زیست‌سازگاری و تجمع انتخابی نانوذرات را در سلول‌های سرطانی، بازدهی روش فوتوترمال تراپی را افزایش خواهد داد[٤].

در این پژوهش از نانوذرات اکسیدگرافن برای ارزیابی تغییرات دما و سمیت آن در جهت بالا بردن بازدهی اثر فوتوترمال تراپی استفاده شد زیرا تحریک‌پذیری بالای حاملان بار و رسانای حرارتی خوب در اکسیدگرافن ویژگی‌های فوتوترمال خوبی به آن می‌بخشد. از سوی دیگر اکسیدگرافن در آب حلالیت قابل قبول و جذب مناسبی در محدوده مادون قرمز دارد[۵].

در این مقاله از دو جهت به بررسی اکسیدگرافن پرداخته شده است

۱- سمیت اکسیدگرافن بر روی رده سلول‌های سرطانی HeLa

۲- تغییرات دمای محلول اکسیدگرافن تحت تاثیر لیزر دیودی با طول موج ۸۰۸nm در توان‌های مختلف با غلظت‌های متفاوت با هدف رسیدن به دمای مطلوب و مرگ سلول‌های سرطانی مورد مطالعه قرار گرفته است.

مواد و روش

در مرحله اول اکسیدگرافن به روش هامر سنتز شد. در مرجع شماره [٦] به خوبی جزئیات آن یافت می‌گردد. سپس محلول اکسیدگرافن با آب مقطر در غلظت‌های ۰/٤، ۰/۳، ۰/۲و۰/۱ میلی‌گرم بر میلی‌لیتر ساخته شد. برای اندازه‌گیری تغییرات دمای نانوذرات با استفاده از لیزر دیودی (لیزر دیودی با طول موج ۸۰۸nm ساخت شرکت پولسار از ایران) با طول موج ۸۰۸nm به صورت منقطع زمانی و پیوسته در توان و زمان‌های مختلف، غلظت‌های ساخته شده تابش‌دهی شدند و توسط دماسنج حساس (Multimetrix مدل TM 62) مورد اندازه‌گیری قرار گرفته است.

در ادامه برای سنجش و ارزیابی زنده‌مانی رده سلول‌های سرطانی HeLa، اثر سمیت نانوذرات اکسیدگرافن با تست MTT مورد مطالعه قرار گرفت. ابتدا ۱۰۰۰ سلول در هرچاهک پلیت ۹٦ خانه کاشته شد و به مدت ٢٤ ساعت درون انکوباتور (۳۷ درجه سانتی‌گراد و ۵ درصد CO_2) قرار گرفت. پس از آن محیط کشت (RPMI 1640) به همراه سرم جنین گاوی (FBS) ۱۵ درصد رویی حذف گشته و محیط کشت جدید که با نمونه‌های اکسیدگرافن رقیق سازی شده به چاهک‌ها تزریق شد و پلیت‌های ۹٦ خانه به مدت ٢٤ و ٤٨ ساعت در انکوباتور قرار داده شد. بعد از گذشت زمان مورد نظر محیط کشت رویی حذف و محلول MTT به اندازه

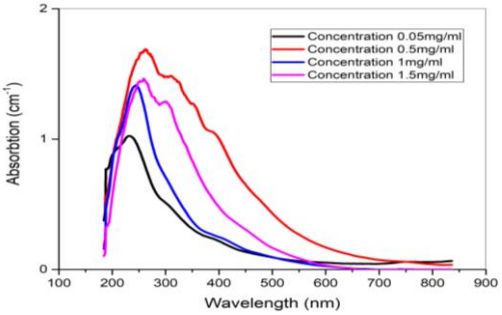
[۱] therapy

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

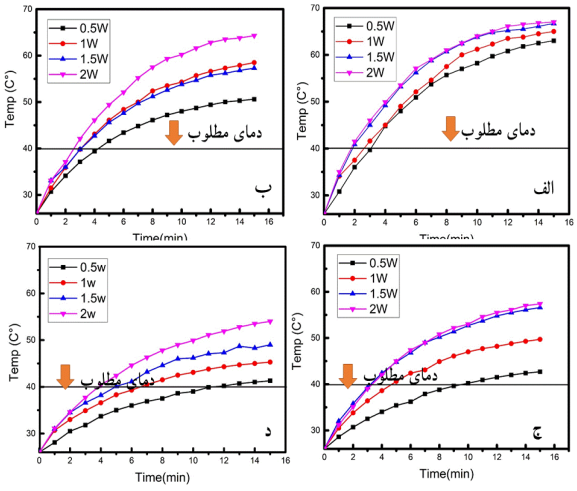
۱۰۰µl را به هر چاهک اضافه شد، پس از گذشت ۳ ساعت محیط رویی دوباره حذف و DMSO به هر چاهک اضافه گشت و در نهایت سلول‌های زنده را در طول موج ۵۷۰nm توسط دستگاه آلایزاریدر خوانده شد.

نتایج آزمایشگاهی

در ابتدا برای نشان دادن مطلوب بودن اکسیدگرافن طیف جذبی UV-Visآن گرفته شد. در شکل۱ پیک جذبی در محدوده تقریبی در طول موج ۲۳۶nm مشاهده شد. مشاهده این پیک در بیناب ثبت شده بر طبق داده‌های منتشر شده حاکی از مطلوب بودن اکسیدگرافن سنتز شده است[۷] .



شکل۱: طیف جذبی UV-Vis اکسیدگرافن



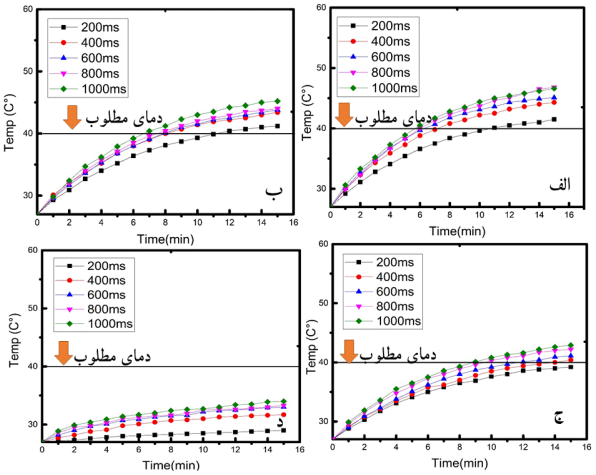
شکل۲: تابش‌دهی با طول موج پیوسته در توان‌های۰/۵تا۲وات به مدت ۱۵ دقیقه برای چهار نمونه با غلظت‌های: الف) ۰/٤ mg/ml ب) ۰/۳ mg/ml ج) ۰/۲ mg/ml د) ۰/۱ mg/ml

در شکل۲، نتایج حاکی از آن است که با افزایش دما محلول اکسیدگرافن با افزایش توان لیزر رابطه مستقیم دارد. با توجه به

[۲]ELISA reader

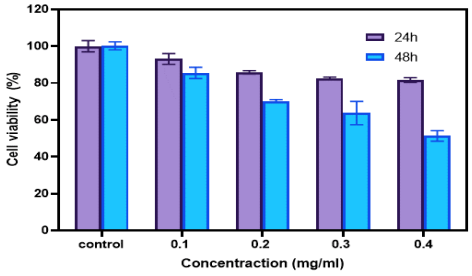
ارزیابی‌های صورت گرفته از میان چهار غلظت ۰/۱، ۰/۲، ۰/۳و ۰/٤، غلظت‌های ۰/۳ و ۰/٤ میلی‌گرم بر میلی‌لیتر غلظت‌های مطلوبی برای رسیدن به مرگ سلولی هستند زیرا به دمای بالاتر از ٤۰°C با توان ۲ وات رسیده‌اند.

در شکل۳، مشاهده می‌شود در تابش‌دهی منقطع زمانی غلظت‌های ۰/۳ و ۰/٤ میلی‌گرم بر میلی‌لیتر با توان متوسط ۰/۵ وات و پهنای زمانی پالس ۱۰۰۰ ms نسبت به غلظت‌های دیگر سریع‌تر به دمای مرگ سلولی رسیده اند.



شکل۳: تابش‌دهی با طول موج منقطع زمانی در توان ۰/۵ وات با پهنای زمانی پالس ۲۰۰ms-۱۰۰۰ به مدت ۱۵ دقیقه برای چهار نمونه با غلظت‌های: الف) ۰/٤mg/ml ب) ۰/۳ mg/ml ج) ۰/۲ mg/ml د) ۰/۱ mg/ml

در صورتی که غلظت‌های دیگر در هر دو نوع تابش‌دهی به درجه دمای پایین‌تری دست یافته‌اند و این ارتباط بین دما با غلظت اکسیدگرافن، مدت تابش‌دهی، نوع تابش‌دهی و توان لیزر را نشان می‌دهد. در این پژوهش تابش‌دهی به صورت پیوسته بازدهی بالاتری دارد زیرا در مدت زمان کوتاه‌تری، دمای نانوذره را به بالای ٤۰°C رسانده است که دمای مطلوب برای مرگ سلولی است[۸].



شکل٤: نمودار اثر سمیت برای چهار غلظت مختلف اکسیدگرافن

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

شکل ٤، نتایج حاصل از سمیت چهار غلظت مختلف از اکسیدگرافن برای دو بازه زمانی ٢٤ و ٤٨ ساعت را نشان می‌دهد. همان طور که مشخص است افزایش غلظت نانوذره و افزایش بازه زمانی، سمیت آن را افزایش می‌دهد. وسلول‌ها در هر چهار غلظت بعد از ٢٤ ساعت بیش از ٨٠٪ زنده مانده‌اند.

نتیجه گیری

در این پژوهش از نانوذرات اکسیدگرافن برای ارزیابی تغییرات دما و سمیت آن استفاده شد. در تابش‌دهی به صورت منقطع زمانی و پیوسته با طول موج ٨٠٨nm بر روی غلظت‌های ٠/١-٠/٤ میلی‌لیتر بر میلی‌گرم در مدت زمان ١٥دقیقه در توان‌های مختلف انجام شد که بهترین نتیجه دو غلظت ٠/٣ و ٠/٤ میلی‌گرم بر میلی‌لیتر برای رسیدن به دمای بالاتر از ٤٠^{o}C بودند.

از مهم‌ترین مزایای فوتوترمال تراپی می‌توان افزایش دمای سلول-های سرطانی به صورت جایگزیده که در نهایت منجر به مرگ سلول‌های سرطانی می‌شود، بدون آسیب به سلول‌های سالم را نام برد. از جمله معایب این روش، ناکارآمد بودن آن است زمانی که متاستاز[٣] ظاهر می‌شود و از طرفی برای رساندن نور به بافت‌های عمیق به فیبر احتیاج پیدا خواهیم کرد.

و اما برای سنجش سمیت اکسیدگرافن و زنده‌مانی سلول‌ها مشاهده کردیم که بهترین بازه زمانی ٢٤ ساعت و مطلوب‌ترین غلظت، هر چهار غلظت بود که ٨٠٪ زنده‌مانی سلول‌ها را به همراه داشتند. در واقع اکسیدگرافن و ساختارهای ترکیبی آن سمیت سلولی کمی دارد[٩] و این اثر سمیت به عواملی چون دوز، اندازه و شکل بستگی دارد. مشتقات گرافن در غلظت کمتر و اندازه کوچکتر زیست سازگاری با لاتری دارند[١٠].

با توجه به بررسی سمیت و تغییرات دمایی محلول اکسیدگرافن در آب با غلظت‌های یاد شده، دو غلظت ٠/١ و ٠/٢ از نظر ناکارآمد بودنشان در انتقال گرما حذف شده و دو غلظت ٠/٣ و ٠/٤ را می-توان غلظت‌های مطلوب‌تری مبنی بر انتقال گرمای خوب و سمیت پایین دانست.

[٣] Metastasis

سپاسگزاری

از همکاری و همراهی پژوهشکده ناباروری یزد از جمله جناب دکتر حبیب نیکوکار و خانم دکتر فاطمه صادقیان کمال تشکر و قدردانی را داریم.

مرجع‌ها

[١] Hanahan, Douglas, and Robert A. Weinberg. “Hallmarks of cancer: the next generation,” *cell* **144**, no. 5, pp. 646-674, (2011)

[٢] Ager, Bryan J., et al. “Advancing clinical research globally: cervical cancer research network from Mexico.” *Gynecologic oncology reports* **25** (2018): 90-93.

[٣] Smith, Leon, Zdenka Kuncic, Kostya Ken Ostrikov,and Shailesh Kumar. “Nanoparticles in cancerimaging and therapy,” *Journal of Nanomaterials* **2012** (2012).

[٤] Honda, Mitsuhiro, Yuika Saito, Nicholas I. Smith, Katsumasa Fujita, and Satoshi Kawata. “Nanoscale heating of laser irradiated single gold nanoparticles in liquid,” *Optics express* **19**, no. 13, pp. 12375-12383, (2011).

[٥] Neklyudov, Vadim V., Nail R. Khafizov, Igor A. Sedov, and Ayrat M. Dimiev. “New insights into the solubility of graphene oxide in water and alcohols,” *Physical Chemistry Chemical Physics* **19**, no. 26, pp. 17000-17008, (2017).

[٦] Xu, Yuxi, Hua Bai, Gewu Lu, Chun Li, and Gaoquan Shi. “Flexible graphene films via the filtration of water-soluble Noncovalent functionalized graphene sheets,” *Journal of the American Chemical Society* **130**, no. 18, pp. 5856- 5857, (2008)

[٧] Xie, Guoqiang, Ju Cheng, Yifan Li, Pinxian Xi, Fengjuan Chen, Hongyan Liu, Fengping Hou et al.“Fluorescent graphene oxide composites synthesis and its biocompatibility study,” *Journal of Materials Chemistry* **22**, no. 18, pp. 9308-9314, (2012).

[٨] Motlagh, NS Hosseini, P. Parvin, Z. H. Mirzaie, R. Karimi, J. H. Sanderson, and F. Atyabi. “Synergistic performance of triggered drug release and photothermal therapy of MCF7 cells based on laser activated PEGylated GO+ DOX,” *BiomedicalOptics Express* **11**, no. 7, pp. 3783-3794, (2020).

[٩] Chang, Y., Yang, S. T., Liu, J. H., Dong, E., Wang, Y., Cao, A., ... & Wang, H. (2011). “In vitro toxicity evaluation of graphene oxide on A549 cells”. *Toxicology letters*, **200(3)**, 201-210.

[١٠] Zhang, H., Gruener, G., & Zhao, Y. (2013). “Recent advancements of graphene in biomedicine”. *Journal of Materials Chemistry B*, ***1*(20)**, 2542-2567.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تأثیر نوع گرافیت بر خواص ساختاری و فیزیکی گرافن اکسید ساخته شده به روش هامرز اصلاح شده

یزدانی دارکی، سپیده[۱]؛ اسلامی کلانتری، محمد[۱]؛ زارع، حکیمه[۲]؛ زونیا، مریم[۲]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد، یزد

[۲] دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد، یزد

چکیده

هدف این مقاله، مقایسه خواص ساختاری و فیزیکی بین گرافن اکسیدهای تهیه شده با استفاده از گرافیت‌های مختلف به عنوان پیش ماده است. گرافن اکسید با روش هامرز اصلاح شده ساخته شد. برای مشخصه‌یابی نمونه‌ها از میکروسکوپ الکترونی روبشی، پراش پرتوی ایکس و طیف‌سنج رامان استفاده شد. تفاوت زیادی در خواص ساختاری و فیزیکی گرافن اکسیدها به دلیل نوع گرافیت استفاده شده، مشاهده می‌شود. ساخت گرافن اکسید با خواص مطلوب‌تر برای کاربردهای صنعتی ضروری است.

واژه‌های کلیدی: *روش هامرز اصلاح شده، گرافن اکسید، گرافیت.*

Effect of graphite type on structural and physical properties of graphene oxide prepared by modified Hummers' method

Yazdani Darki, Sepideh[1]; Eslami-Kalantari, Mohammad[1]; Zare, Hakimeh[2]; Zounia, Maryam[2]

[1] *Department of Physics, Yazd University, Yazd.*
[2] *Department of Physics, Yazd University, Yazd.*

Abstract

The aim of this paper is to compare the structural and physical properties between graphene oxides prepared using different graphits as precursors. Graphene oxide was prepared by the modified Hummers' method. Scanning electron microscopy, X-ray diffraction, and Raman spectroscopy were used to characterize the samples. significant differences were observed in structural and physical properties of graphene oxides due to type of used graphite. The synthesis of graphene oxide with desirable properties is essential for industrial applications.

***Keywords**: Modified Hummers' method, graphene oxide, graphite*

PACS No.70

مقدمه

گرافن، جادوی قرن ۲۱ به دلیل داشتن ویژگی‌های منحصر به فرد مکانیکی و الکتریکی، بسیار مورد توجه محققان قرار گرفته است [۲ و۱]. گرافن دارای خواص ویژه از جمله ضخامت در حد تک اتم، شفافیت و استحکام مکانیکی بالا، چقرمگی مناسب، غیرقابل نفوذ در برابر گازها و رسانش الکتریکی و حرارتی بالا می‌باشد [۳]. گرافن در سال ۲۰۰٤، به روش تورق میکرومکانیکی و با استفاده از چسب اسکاج ساخته شد و سپس با استفاده از ابزارهای شناسایی دقیق مانند میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) و میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM) شناسایی شد [٤]. تاکنون روش‌های متعددی برای ساخت گرافن اکسید (GO) گزارش شده است. از روش‌های مرسوم، روش‌لایه‌برداری گرافیت

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

برای تولید گرافن اکسید، با استفاده از اکسید کننده‌های قوی مانند پتاسیم پرمنگنات ($KMnO_4$) است [٤]. این ماده، مقرون به صرفه و در دسترس می‌باشد [٥]. از روش‌های شیمیایی اکسیداسیون GO می‌توان روش برودی[1] در سال ۱۸۵۹ نام برد که از پتاسیم کلرات ($KClO_3$) و نیتریک اسید (HNO_3) به عنوان اکسید کننده استفاده نمود [٦]. استودن مایر[2] نیز در سال ۱۸۹۸، برای اکسیداسیون گرافیت، سولفوریک اسید (H_2SO_4)، HNO و $KClO_3$ به کار برد [٧]. هامرز در سال ۱۹۵۸، با استفاده از $KMnO_4$، سدیم نیترات ($NaNO_3$) و H_2SO_4 توانست یکی از بهترین روش‌ها برای اکسیداسیون گرافیت را ارائه دهد که تاکنون گزارش‌های متعددی مبنی‌بر ساخت گرافن اکسید با این روش مطرح شده است [٨]. مارکانو و همکارانش در سال ۲۰۱۰، گرافن اکسید را به روش هامرز بهبودیافته ساختند. گرافن اکسید تولید شده در این روش نسبت به روش هامرز، آبدوست‌تر است و در طی فرایند ساخت گرافن اکسید، گاز سمی تولید نمی‌شود و مقدار ماده نهایی نیز افزایش یافته است [٤].

در این پژوهش، گرافن اکسید به روش هامرز اصلاح شده ساخته شد. در این فرایند، به منظور افزایش اکسیداسیون، پتاسیم پرمنگنات در دو مرحله به واکنش ساخت گرافن اکسید اضافه شد. همچنین، تأثیر دو نوع گرافیت به عنوان پیش‌ماده بر روی خواص فیزیکی و ساختاری گرافن اکسید ساخته شده بررسی شد. با استفاده از آنالیزهای SEM، رامان و پراش پرتوی ایکس (XRD) نمونه‌ها مورد بررسی قرار گرفتند.

بخش تجربی

مواد و تجهیزات

در این پژوهش برای ساخت گرافن اکسید از دو نوع گرافیت به عنوان پیش‌ماده، سولفوریک اسید (۹۵-۹۷٪)، نیتریک اسید، پتاسیم پرمنگنات، هیدروژن پراکسید و هیدروکلریک اسید از شرکت مرک خریداری شد. اندازه و شکل نمونه حاصل با استفاده از میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) Vega3 Tescan ساخت کشور چک بررسی شد. از دستگاه XRD، X'PertPro ساخت کشور هلند، برای مطالعه و تعیین فاصله بین لایه‌ها، طیف‌سنج رامان شرکت تکسان ساخت ایران برای بررسی ساختار و خصوصیات کیفی لایه‌های نازک گرافن اکسید استفاده شد.

روش آزمایش

ساخت گرافن اکسید

گرافن اکسید به روش هامرز اصلاح شده با دو نوع گرافیت ساخته شد. برای ساخت گرافن اکسید، ابتدا ۰٫۵ گرم سدیم نیترات به یک گرم گرافیت در دمای صفر درجه اضافه و به مدت ۵ دقیقه تحت همزدن قرار گرفت. ۲۳ میلی‌لیتر سولفوریک اسید قطره قطره به مواد اولیه اضافه و سپس ۳ گرم پتاسیم پرمنگنات به واکنش اضافه شد. در طول اضافه کردن پتاسیم پرمنگنات، دمای واکنش بایستی کمتر از ۲۰ درجه سانتی‌گراد باقی بماند. به منظور حل کامل پتاسیم پرمنگنات، مخلوط در دمای صفر درجه به مدت ۱۵ دقیقه تحت همزدن قرار گرفت. نمونه‌ی حاصل به مدت ۷ ساعت در دمای ۳۵ درجه سانتی‌گراد همزده شد. در مرحله بعد، ۳ گرم پتاسیم پرمنگنات به واکنش اضافه شد و واکنش به مدت ۱۲ ساعت دیگر در دمای ۳۵ درجه سانتی‌گراد تحت همزدن قرار گرفت. سپس دمای واکنش به ۳ درجه سانتی‌گراد کاهش داده شد. رنگ ماده‌ی حاصل، قهوه‌ای تیره می‌باشد. ۱۳۳ میلی‌لیتر آب مقطر، قطره قطره به ماده‌ی حاصل اضافه و بعد از آن ۱ میلی‌لیتر هیدروژن پراکسید به آرامی اضافه شد. در حین اضافه کردن آب مقطر و هیدروژن پراکسید، دما بایستی کمتر از ۸ درجه سانتی‌گراد باشد. رنگ محلول بعد از اضافه کردن این حلال‌ها به زرد و سپس به قهوه‌ای روشن تغییر یافت. بعد از ۱۵ دقیقه همزدن، ماده با استفاده از کاغذ صافی فیلتر و در نهایت با آب مقطر، اتانول و هیدروکلریک اسید شستشو داده شد تا pH محلول به ٤ برسد. در نهایت محصول نهایی به مدت ٢٤ ساعت در دمای ٦٠ درجه سانتی‌گراد خشک شد.

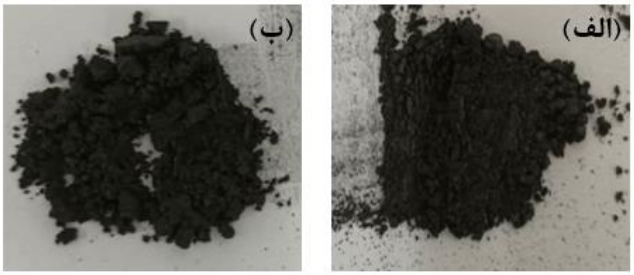
نتایج و بحث

شکل ۱ تصاویر دو گرافیت مختلف استفاده شده در ساخت گرافن اکسید به روش هامرز اصلاح شده را نشان می‌دهد.

[1] Brodie
[2] Staudenmaier

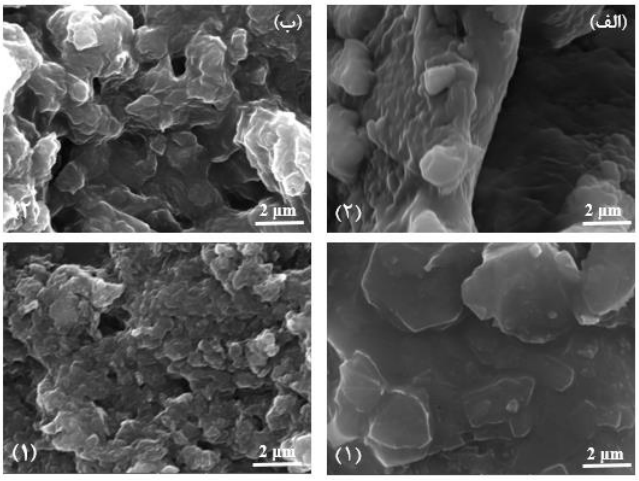
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

شکل‌های ا (الف) و (ب) به ترتیب مربوط به نمونه ۱ و نمونه ۲ می‌باشد. نمونه ۱ نسبت به نمونه ۲ کدرتر و نرم‌تر است.



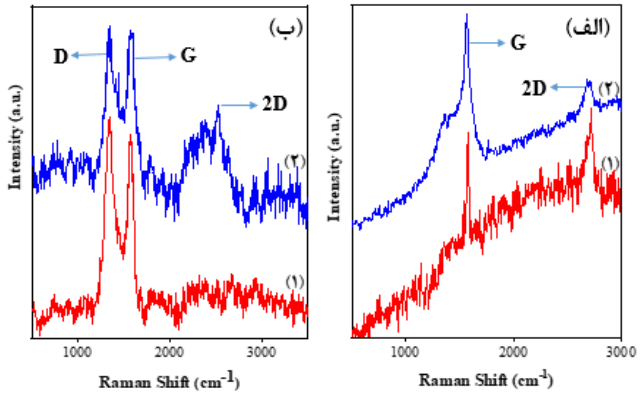
شکل ۲: تصاویر گرافیت: (الف) نمونه ۱ و (ب) نمونه ۲.

شکل ۲ تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی دو نوع گرافیت (شکل ۲ (الف))، و گرافن اکسید ساخته شده به روش هامرز اصلاح شده (شکل ۲ (ب)) را نشان می‌دهد. همان‌طور که در شکل ۲ (الف) مشاهده می‌کنید، نمونه ۱ از میکروصفحات و نمونه ۲ از میکروصفحات و میکروذرات کلوخه‌ای تشکیل شده‌اند. پس از فرایند ساخت گرافن اکسید، شکل ۲ (ب)، نمونه ۱ و ۲ شامل صفحات میکرومتری هستند اما اندازه صفحات در نمونه ۱ کمتر از نمونه ۲ است و در نمونه‌ی ۲، ساختار به صورت کلوخه‌ای است و ساختار گرافیتی نیز در نمونه مشاهده می‌شود. دراین تصاویر، تک لایه‌ای بودن و یا چند لایه‌ای بودن گرافن اکسید مشخص نیست.



شکل ۲: تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی (الف) گرافیت (ردیف بالا: نمونه ۲ و ردیف پایین: نمونه ۱) و (ب) گرافن اکسید ساخته شده به روش هامرز اصلاح شده (ردیف بالا: نمونه ۲ و ردیف پایین: نمونه ۱).

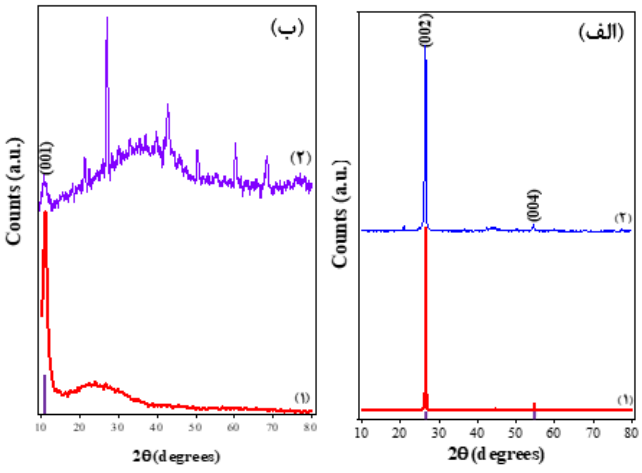
شکل ۳ (الف) طیف‌های رامان دو نوع ماده گرافیت و شکل ۲ (ب) نمونه گرافن اکسید ساخته شده به روش هامرز اصلاح شده را نشان می‌دهد. با کمک طیف‌های رامان می‌توان پیوندهای دوگانه مزدوج و کربن-کربن را مشخص کرد. نوار G مربوط به فونون E_{2g} از اتم‌های کربن sp^2 می‌باشد. نوار D مربوط به مد تنفسی فونون‌های نقطه‌ی κ از تقارن A_{1g} می‌باشد. این نوار نشان‌دهنده‌ی بی‌نظمی است که ناشی از نقص‌های خاص مانند جاهای خالی، مرزدانه‌ها و گونه‌های کربن بی‌شکل (آمورف) می‌باشد و اختلال ناشی از اکسیداسیون را نشان می‌دهد. نسبت شدت این دو نوار (I_D/I_G) نشان‌دهنده‌ی کیفیت محصول است [۹]. در شکل ۳ (الف)، نوار G در ۱۵۷۵ و ۱۵۶۱٫۳۳ cm^{-1} مشاهده می‌شود، که به ترتیب نمونه ۱ و ۲ می‌باشد. هم‌چنین در هر دو نوع گرافیت نوار 2D نیز مشاهده می‌شود که نشان‌دهنده‌ی حالت دو فونونی می‌باشد [۱۰]، که به ترتیب در نمونه ۱ و ۲، در ۲۷۱۵ و ۲۶۷۹٫۰۹ cm^{-1} قرار دارد [۱۱]. در شکل ۳ ب، نوار D در ۱۳۴۲٫۱۶ و ۱۳۴۲٫۶۸ cm^{-1} و نوار G در ۱۵۷۸٫۸۸ و ۱۵۸۰٫۰۲ cm^{-1} مشاهده می‌شود که به ترتیب مربوط به نمونه ۱ و ۲ می‌باشد. نسبت شدت این نوارها برای نمونه ۱ و ۲ به ترتیب، ۰٫۸۵ و ۰٫۸۴ است. نمونه ۲ دارای نوار 2D در محدوده‌ی ۲۵۲۹٫۴۱ cm^{-1} می‌باشد. در طیف رامان گرافن اکسید نمونه ۲ (شکل ۳ ب)، دارای قله‌ی پهن در محدوده‌ی ۲۱۰۰ تا ۲۷۰۰ cm^{-1} می‌باشد که نشان از چند لایه‌ای گرافیت و گرافن می‌باشد.



شکل ۳: طیف های رامان (الف) گرافیت و (ب) گرافن اکسید حاصل از نمونه‌های ۱ و ۲.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

شکل ٤ الگوهای XRD نمونه ۱ و ۲ قبل و بعد از ساخت گرافن اکسید را نشان می‌دهد. در هر دو نمونه گرافیت (شکل ٤ (الف)) قله‌های ۲٦٫۵۵ و ۵٤٫٦٦ درجه مشاهده می شود که مربوط به صفحات (۰۰۲) و (۰۰٤) می‌باشد [۱۲]. فاصله‌ی صفحات در گرافیت نمونه ۱ و ۲، ۳٫۳٤ و ۳٫۳۵ آنگستروم می‌باشد. در شکل ٤ (ب) الگوهای پراش اشعه ایکس مربوط به نمونه‌های گرافن اکسید ساخته شده از نمونه‌های ۱ و ۲ را نشان می‌دهد. قله‌ی واقع در ۱۰٫٦۲۵ درجه در نمونه‌ی ۱، نشان‌دهنده‌ی گرافن اکسید است که مربوط به صفحه‌های (۰۰۱) گرافن اکسید می‌باشد [۱۲]. در نمونه ۲، قله‌های واقع در ۲۱٫۲۲۵ و ۲٦٫۹۲۵ درجه مربوط به گرافیت است. این نمونه نشان می‌دهد که ترکیبی از گرافیت و گرافن اکسید وجود دارد. قله‌های واقع در ۳٦٫۹۳، ٤۲٫۸۳، ۵۰٫٤۱، ٦۰٫۲۵ و ٦۸٫٤۱ درجه مربوط به $KMnO_4$ است. با وجود فرایند شستشوی مشابه، مقدار $KMnO_4$ در ساختار نمونه‌ی ۲ باقی مانده است. فاصله‌ی صفحات گرافن اکسید نمونه‌های ۱ و ۲ به ترتیب، ۸٫۰٦ و ۸٫۳۲ آنگستروم می‌باشد. هر چه مقدار 2θ کمتر باشد فاصله بین صفحات بیش‌تر است یعنی اکسیداسیون بهتر و نزدیک به گرافن اکسید تک لایه می‌باشد. گرافن اکسید ساخته شده از نمونه ۱ نسبت به نمونه‌ی ۲ دارای خلوص بیشتر و همچنین مقدار گرافیت کمتر است.



شکل ٤: طیف پراش پرتوی ایکس (الف) گرافیت و (ب) گرافن اکسید حاصل از نمونه‌های (الف) ۱ و (ب) ۲.

نتیجه‌گیری

ساخت گرافن اکسید با کیفیت بالا و اکسیداسیون بیش‌تر با استفاده از روش هامرز اصلاح شده ساخته شد. در این پژوهش مشاهده شد نوع پیش‌ماده گرافیت (نمونه ۱ و ۲) تأثیر زیادی بر ساختار نهایی گرافن اکسید دارد. به‌طوری که گرافن اکسید ساخته شده از نمونه ۱، شامل صفحات و ذرات میکرومتری کلوخه شده است، ولی استفاده از گرافیت نمونه ۲ در فرایند واکنش، صفحات میکرومتری و کلوخه‌ای تشکیل شد. در هر دو نمونه بعد از ساخت به روش هامرز اصلاح شده و تشکیل گرافن اکسید با استفاده از روش پراش پرتوی ایکس می‌توان مشاهده کرد که با افزایش $KMnO_4$ در هر دو نمونه، نمونه ۱ دارای فاصله صفحات کمتر و اکسیداسیون بیش‌تر و تک لایه‌تر می‌باشد اما در نمونه گرافن اکسید ساخته شده با استفاده از گرافیت نمونه ۲، علاوه بر گرافن اکسید، گرافیت و $KMnO_4$ در ساختار باقی مانده است.

مرجع‌ها

[۱] Panicker, Nithin Joseph, Jagat Das, and P. P. Sahu. "Synthesis of highly oxidized graphene (HOG) by using HNO3 and KMnO4 as oxidizing agents." Materials Today: Proceedings 46 (2021): 6270-6274.
[۲] Abdelhamid, Hani Nasser, and Kamal Hany Hussein. "Graphene oxide as a carrier for drug delivery of methotrexate." Biointerface Res. Appl. Chem 11 (2021): 14726-14735.
[۳] Kakade, Prashant M., et al. "Graphene oxide assisted synthesis of magnesium oxide nanorods." ES Materials & Manufacturing 12.2 (2021): 63-71.
[۴] Marcano, Daniela C., et al. "Improved synthesis of graphene oxide." *ACS nano* 4.8 (2010): 4806-4814.
[۵] Cao, Qingwei, et al. "Arsenic (V) removal behavior of schwertmannite synthesized by $KMnO_4$ rapid oxidation with high adsorption capacity and Fe utilization." Chemosphere 264 (2021): 128398.
[۶] Brodie, Benjamin Collins. "XIII. On the atomic weight of graphite." *Philosophical transactions of the Royal Society of London* 149 (1859): 249-259.
[۷] Staudenmaier, L. "Verfahren zur darstellung der graphitsäure." *Berichte der deutschen chemischen Gesellschaft* 31.2 (1898): 1481-1487.
[۸] Hummers Jr, William S., and Richard E. Offeman. "Preparation of graphitic oxide." *Journal of the merican chemical society* 80.6 (1958): 1339-1339.
[۹] Johra, Fatima Tuz, Jee-Wook Lee, and Woo-Gwang Jung. "Facile and safe graphene preparation on solution based platform." Journal of Industrial and Engineering Chemistry 20.5 (2014): 2883-2887.
[۱۰] Zólyomi, V., Koltai, J., & Kürti, J. Resonance Raman spectroscopy of graphite and graphene. physica status solidi (b), 248(11), (2011) 2435-2444.
[۱۱] Alhwaige, A. A., Alhassan, S. M., Katsiotis, M. S., Ishida, H., & Qutubuddin, S. "Interactions, morphology and thermal stability of graphene-oxide reinforced polymer aerogels derived from star-like telechelic aldehyde-terminal benzoxazine resin." RSC advances, 5(112), (2015). 92719-92731.
[۱۲] Ain, Q. T., Haq, S. H., Alshammari, A., Al-Mutlaq, M. A., & Anjum, M. N. The systemic effect of PEG-nGO-induced oxidative stress in vivo in a rodent model. Beilstein journal of nanotechnology, 10(1), (2019). 901-911.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مطالعه‌ی مد بازگشتی مغناطیسی آرایه‌ی نانوسیم‌های آهن ساخته شده به روش الکتروانباشت پالسی درون قالب آلومینای آندی حفره‌دار

نوری، فرزانه[۱]؛ الماسی کاشی، محمد[۲]؛ منتظر، امیرحسن[۱]

[۱]پژوهشکده علوم و فناوری نانو دانشگاه کاشان، کیلومتر ۶ بلوار قطب راوندی، کاشان

[۲]گروه فیزیک، دانشگاه کاشان

چکیده

آرایه‌ی نانوسیم‌های آهن با روش الکتروانباشت پالسی متناوب درون قالب آلومینای آندی با قطر ۳۰ نانومتر ساخته شد. آنالیز پراش پرتو ایکس نشان داد که نانوسیم‌های آهن دارای ساختار بلوری مکعبی مرکز پر(bcc) با جهت بلوری [110] هستند. وادارندگی و نسبت مربعی آرایه‌ی نانوسیم‌های آهن را به وسیله‌ی مغناطومتر نمونه مرتعش در زوایای $0\leq\theta\leq90$ اندازه‌گیری شد. وادارندگی و نسبت مربعی آرایه‌ی نانوسیم‌های آهن ۱۶۳۵ و ۰/۹۱ در حالت میدان اعمالی موازی با محور نانوسیم‌ها به دست آمد و با اعمال میدان عمود بر نانوسیم‌ها وادارندگی و نسبت مربعی به ترتیب ۷۰٪ و ۵۰٪ کاهش یافتند. تغییرات زاویه‌ای وادارندگی از زاویه‌ی صفر تا ۷۵ درجه تقریباً ثابت است و از زاویه ۷۵ تا ۹۰ روند کاهشی دارد که بیانگر انتشار مد دیواره‌ی حوزه گردابی درون نانوسیم‌ها است.

واژه های کلیدی:

قالب آلومینای آندی، الکتروانباشت پالسی متناوب،آرایه نانوسیم‌های آهن، وادارندگی زاویه‌ای، نسبت مربعی زاویه‌ای

The study of magnetic reversal mode of Fe nanowires array fabricated by pulsed electrodeposition method into porous anodic alumina template

Noori, Farzaneh[1]; Almasi Kashi, Mohammad[2]; Montazer, Amir Hassan[1]

[1] Institute of Nanoscience and Nanotechnology, University of Kashan, Kashan

[2] Department of Physics, University of Kashan, Kashan

Abstract

The Fe nanowires array was fabricated by a pulse alternating current electrodeposition method in an anodic alumina template with 30 nm in diameter. Using X-ray diffraction analysis, the crystal structure of the Fe nanowires was obtained to be the body centered cubic (bcc) with a crystalline direction of [110]. The magnetic properties of the sample were measured by a vibrating sample magnetometer (VSM) at different angles $0\leq\theta\leq90°$. The coercivity and squareness of the Fe nanowires array were found to be 1635 Oe and 0.91 in parallel applied field to the axis of the nanowires, by increasing the field angle to 90° (perpendicular to the nanowire axis), the coercivity and squareness decreased 70% and 50%, respectively. The amount of coercivity remained almost constant when $0<\theta<75°$ and decrease for $75<\theta<90°$, indicating the propagation of the vortex domain wall.

***Keywords**: Anodic Alumina Template, Alternating pulsed Electrodeposition, Fe Nanowire Array, Magnetic Properties, Hysteresis loop*

PACS No. 81

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مقدمه

آرایه‌های نانوسیم فلزی و مغناطیسی با توجه به خواص ویژه‌شان در دو دهه اخیر به صورت چشمگیری مورد توجه پژوهشگران قرار گرفته‌اند. نانوسیم‌های مغناطیسی در صنایع مختلف از جمله الکترونیک، اسپینترونیک، اپتیک و پزشکی می‌توانند به عنوان حافظه‌های عمودی، بلورهای نوری ، جاذب در رادارها، گرما درمانی و دارورسانی به کار روند[۱-۳].

از روش‌های رایج ساخت آرایه‌های نانوسیم مغناطیسی می‌توان به ساخت قالب آلومینای آندی حفره دار و پر کردن آن به وسیله‌ی روش‌های الکتروانباشت اشاره کرد[۴]. مزیت‌های قالب آلومینای حفره‌دار نظم زیاد، چگالی حفره‌ای بالا و استحکام زیاد آن است. روش الکتروانباشت پالسی نیز روشی آسان و مقرون به صرفه برای پرکردن حفره‌ها به شمار می‌رود.

تا اوایل قرن ۲۱ خواص مغناطیسی نانوسیم‌های آهن در صدر مواد فرومغناطیس قرار داشت[۵]. به دلیل اکسیداسیون سریع آهن پژوهش‌های کمتری بر روی آهن انجام شد و پژوهشگران به نانوساختارهای کبالت روی آوردند و موفق به ساخت نانوساختارهای کبالت با خواص مغناطیسی بالا شدند. بدین ترتیب خواص مغناطیسی کبالت از آهن پیشی گرفت[۶].

هم‌چنان به نظر می‌رسد که آهن به دلیل خواص مغناطیسی منحصر به فردش می‌تواند جایگزین فلزات خاکی کمیاب باشد و در ساخت آهنرباهای دائمی و محیط‌های ثبت مغناطیسی توجه قرار گیرد. در این مقاله آرایه‌ای از نانوسیم های آهن درون قالب آلومینای حفره دار به روش الکتروانباشت پالسی متناوب ساخته شد و خواص مغناطیسی و مد بازگشت مغناطیسی آن‌ها بررسی می‌گردد.

روش آزمایش

ورقه آلومینیوم با خلوص ٪۹۹/۹۹۹ به صورت قرصی با قطر ۱۰ میلی‌متر و ضخامت ۰/۵ میلی‌متر برش داده شد. جهت چربی‌زدایی و حذف آلودگی‌های روی سطح نمونه به مدت ۳ دقیقه در استون و تحت امواج فراصوت مورد شست‌وشو قرار گرفت. قبل از آندایزاسیون برای دستیابی به سطحی صاف و صیقلی، نمونه به مدت ۵ دقیقه در یک سلول الکتروشیمیایی حاوی اتانول و اسید پرکلریک با نسبت ۴ به ۱ و دمای ۰ درجه سانتیگراد تحت ولتاژ ثابت ۲۰ ولت الکتروپولیش شد. پس از آن با آب دو بار تقطیر شسته شد و تحت ولتاژ ۴۰ ولت و دمای ۱۷ درجه سانتیگراد در مجاورت محلول ۰/۳ مولار اسید اکسالیک به مدت ۵ ساعت مورد آندایز قرار گرفت. حفره‌های تشکیل شده در این مرحله کاملاً منظم نیستند به منظور دستیابی به قالبی با نظم بالا سونش شیمیایی در مجاورت اسید کرومیک ۰/۲ مولار و اسید فسفریک ۰/۵ مولار لایه‌ی اکسیدی سطح آلومینیوم در دمای ۶۰ درجه سانتیگراد و به مدت ۶ ساعت حذف گردید. بدین ترتیب بافت مقعری روی سطح آلومینیوم بر جای ماند که محل جوانه‌زنی حفره‌ها در آندایز مرحله دوم هستند. آندایز مرحله دوم تحت شرایط آندایز مرحله‌ی اول به مدت ۴ ساعت صورت گرفت.

پس از آماده شدن قالب جهت الکتروانباشت پالسی متناوب ابتدا باید نازک سازی لایه‌ی سدی، که لایه‌ای عایق با مقاومت بالا است، صورت گیرد. برای این کار توسط فرآیند آندایز غیرتعادلی، ولتاژ نازک سازی را از ۴۰ به ۱۰ ولت کاهش دادیم و نمونه برای الکتروانباشت پالسی آماده شد.

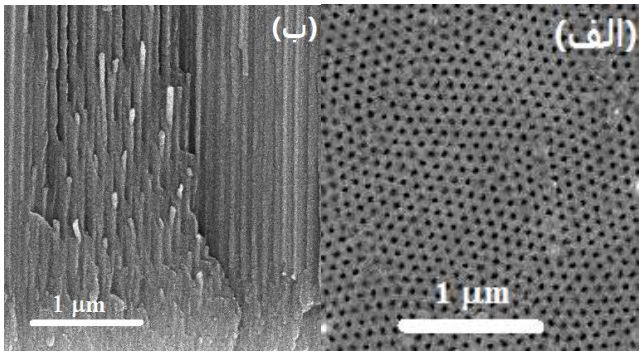
الکتروانباشت جریان متناوب پالسی با به کار بردن موج سینوسی با پتانسیل کاهش-اکسایش، زمان کاهش-اکسایش و زمان خاموشی به ترتیب ۱۰-۱۰ولت، ۰/۵-۰/۵ میلی ثانیه و۴۰ میلی ثانیه انجام شد. در طی فرایند الکتروانباشت بار ۱,۵ کولن با چگالی جریان ۶۰ mA/cm^2 در مجاورت محلول ۰,۳ مولار آهن، ۴۵ گرم بر لیتر اسید بوریک و ۱ گرم بر لیتر اسکوربیک اسید با اسیدیته ۴ و دمای الکترولیت ۳۰ درجه سانتیگراد درون قالب انباشت یافت. به منظور انباشت یون‌های آهن در قالب آلومینای حفره‌دار، نمونه به عنوان کاتد و ورقه گرافیتی به عنوان آند در سلول الکتروشیمیایی به کار رفتند.

ریخت شناسی آرایه‌ی نانوسیم‌های آهن توسط میکروسکوپ الکترونی روبشی(FESEM)، ساختار بلوری آن با استفاده از آنالیز (XRD) و خواص مغناطیسی آن توسط مغناطومتر نمونه مرتعش (VSM) ارزیابی شد.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

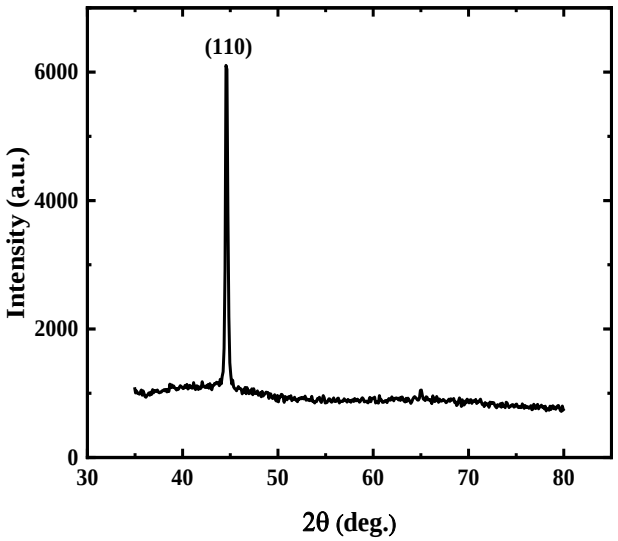
بحث و نتایج

شکل۱ تصاویر FESEM از نمای بالا و از سطح مقطع آرایه نانوسیم‌های آهن درون قالب آلومینا را نشان می‌دهد. شکل۱(الف) نشان می‌دهد قالب AAO دارای قطر ۳۰ نانومتر و فاصله بین حفره‌ای ۱۰۰ نانومتر هستند. از تصویر سطح مقطع آرایه نانوسیم که در شکل۱(ب) آمده است می‌توان دریافت که قطر نانوسیم‌ها در توافق کامل با قطر نانوحفره‌های قالب آلومینا است و حفره‌ها به صورت یکنواخت پر شده‌اند.

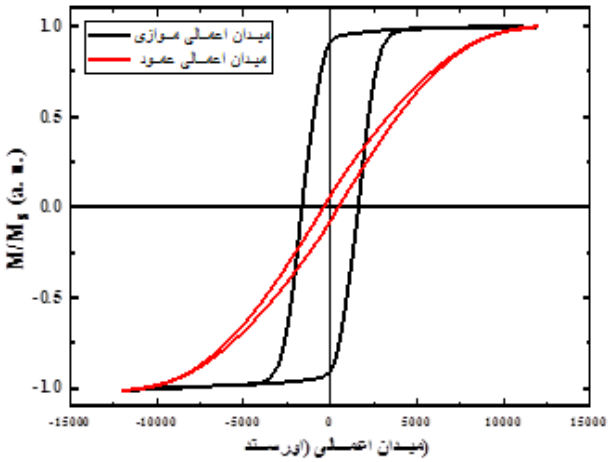


شکل ۱ : تصاویر FESEM از نانوسیم‌های آهن الکتروانباشت درون قالب آلومینای حفره‌دار: (الف) تصویر سطحی از قالب (ب) تصویر برش عرضی از نانوسیم‌های آهن جای گرفته درون آن.

الگوی پراش پرتوی ایکس در شکل۲ نشان می‌دهد که آرایه نانوسیم‌های آهن دارای یک قلّه در زاویه ۴۴/۶۵ درجه است که این قلّه مربوط به ساختار بلوری مکعبی مرکز پر و صفحه (۱۱۰) آهن است.



شکل ۲ : الگوی XRD نانوسیم‌های آهن رشد یافته درون قالب آندی.



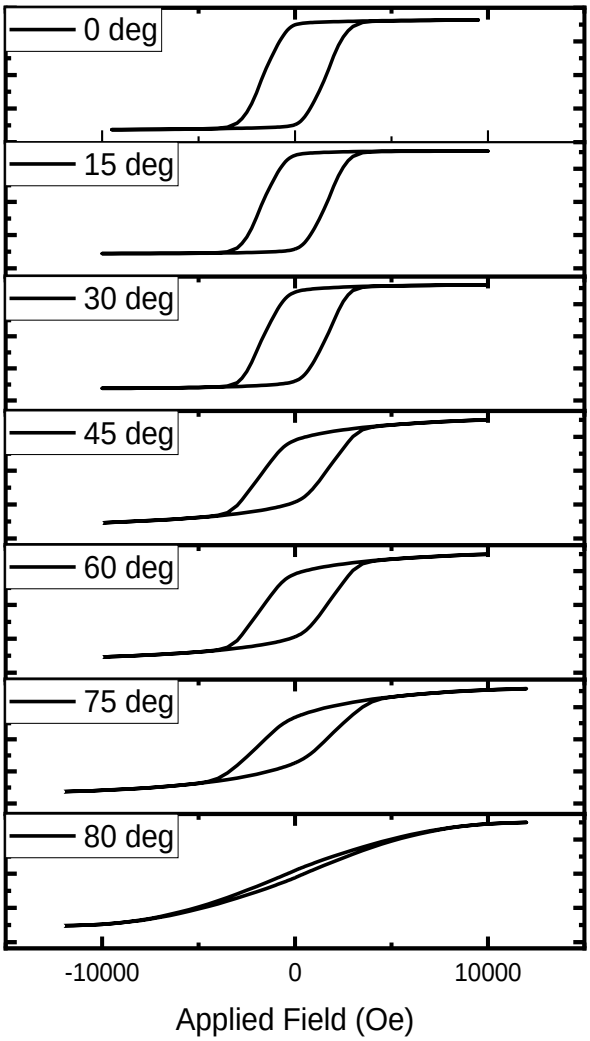
شکل ۳ : حلقه‌های پسماند آرایه نانوسیم آهن انباشت شده درون قالب آلومینای آندی در دو جهت میدان اعمالی موازی و عمود بر محور نانوسیم‌ها.

حلقه‌های پسماند آرایه نانوسیم در دو جهت اعمال میدان مغناطیسی (موازی و عمود) بر محور نانوسیم‌ها توسط دستگاه مغناطومتر نمونه مرتعش (VSM) اندازه‌گیری شدند و در شکل۳ مشاهده می‌شوند. نیروی وادارندگی و نسبت مربعی در در راستای اعمال میدان موازی نانوسیم‌ها به ترتیب ۱۶۳۵ اورستد و ۰/۹۱ و در راستای میدان اعمالی عمود بر نانوسیم‌ها وادارندگی و نسبت مربعی به ترتیب به ۴۶۰ و۰/۴۲ حاصل شدند. علت کاهش خواص مغناطیسی آرایه نانوسیم آهن با تغییر زاویه از صفر به ۹۰، ناهمسانگردی شکلی بالای نانوسیم‌ها است.

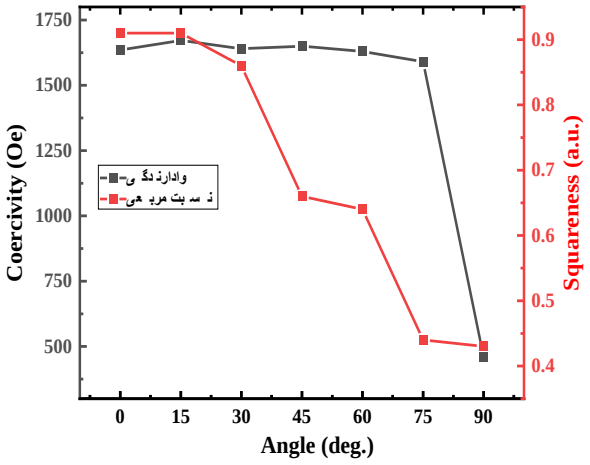
با ساخت آرایه نانوسیم‌های آهن با بافت [۱۱۰] می‌توان مد بازگشت مغناطش را مطالعه نمود. برای یافتن مد بازگشت مغناطیسی ابتدا وابستگی زاویه‌ای حلقه‌های پسماند در زوایای ۰ تا ۹۰ درجه با فاصله ۱۵ درجه اندازه‌گیری شدند. حلقه‌های پسماند در زوایای ۰، ۱۵،۳۰، ۴۵، ۶۰، ۷۵ و ۹۰ درجه در شکل۴ نمایش داده شده‌اند. سپس مقادیر وادارندگی زاویه‌ای و نسبت مربعی زاویه‌ای از حلقه‌های پسماند استخراج شدند و در شکل ۵ نمودار تغییرات زاویه‌ای وادارندگی و نسبت مربعی آرایه نانوسیم آهن مشاهده می‌شود.

بر اساس حلقه‌های پسماند زاویه‌ای آرایه‌ی نانوسیم‌های آهن می‌توان اظهار داشت که با افزایش زاویه از ۰ درجه تا ۹۰ درجه حلقه‌های پسماند از حالت مربعی خارج می‌شوند طوری‌که در

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل ۴ : حلقه‌های پسماند آرایه نانوسیم آهن انباشت شده در قالب آئومینای حفره‌دار در زوایای ۰، ۱۵، ۳۰، ۴۵، ۶۰، ۷۵ و ۹۰ درجه به ترتیب از بالا به پایین.



شکل۵ : تغییرات وادارندگی و نسبت مربعی آرایه‌ی نانوسیم‌های آهن تابعی از زاویه‌ی میدان اعمالی.

زاویه ۹۰ درجه حلقه به خط باریک تبدیل می‌شود. که می‌توان وابستگی شدید خواص مغناطیسی به زاویه‌ی میدان اعمالی با محور نانوسیم‌ها را مشاهده کرد. از آنجایی‌که ناهمسانگردی مغناطوبلوری آهن بسیار ضعیف است، در واقع علت اصلی این وابستگی به شکل ذاتی نانوسیم‌ها یعنی ناهمسانگردی شکلی موجود برمی‌گردد.

شکل۵ نشان می‌دهد با افزایش زوایه از صفر به ۹۰ درجه نسبت مربعی روند نزولی داشته و حدود ۵۰ درصد کاهش می‌یابد. اما وادارندگی از زاویه ۰ تا ۷۵ درجه تقریبا ثابت بوده و در زاویه‌ی ۷۵ درجه کاهش ۷۰ درصدی وادرندگی را شاهد هستیم که مد بازگشتی مغناطیسی در آرایه‌ی نانوسیم‌های آهن را می توان بر اساس انتشار دیواره‌ی حوزه ی گردابی دانست[۷].

نتیجه گیری

آرایه نانوسیم‌های آهن با ساختار bccو جهت بلورینگی[۱۱۰] به وسیله‌ی فرایند الکتروانباشت جریان متناوب پالسی درون قالب آلومینا با قطر ۳۰ نانومتر ساخته شدند. حلقه‌های پسماند زاویه‌ای این نانوسیم‌ها، ناهمسانگردی کلی وابسته به شکل ذاتی نانوسیم را نشان می‌دهند. نحوه‌ی تغییرات زاویه‌ای حلقه‌های پسماند، مد بازگشت مغناطیسی آرایه نانوسیم‌های آهن را انتشار دیواره حوزه گردابی به دست می‌دهد.

مرجع‌ها

[۱] G. Brambilla, F. Xu, P. Horak, Y. Jung, F. Koizumi, N.P. Sessions, E. Koukharenko, X. Feng, G.S. Murugan, J.S. Wilkinson, "Optical fiber nanowires and microwires: fabrication and applications", *Adv. Opt. Photonics*, **1** (2009) 107-161.
[۲] A. Mukhtar, K .Wu, X. Cao, "Magnetic nanowires in biomedical applications", *Nanotechnology*, **31** (2020) 433001.
[۳] W. Li, Z. Akhter, M. Vaseem, A. Shamim, "Optically Transparent and Flexible Radio Frequency Electronics through Printing Technologies", *Adv. Mater. Technol.*,**7** (2022)2101277.
[۴] Y. Zhang, G. Li, Y. Wu, B. Zhang, W. Song, L. Zhang, "Antimony nanowire arrays fabricated by pulsed electrodeposition in anodic alumina membranes", *Adv. Mater.*, **14** (2002) 1227-1230.
[۵] H. Zeng, R. Skomski, L. Menon, Y. Liu, S. Bandyopadhyay, D.J. Sellmyer, "Structure and magnetic properties of ferromagnetic nanowires in self-assembled arrays", *Phys. Rev. B*, **65** (2002) 134426.
[۶] A. Montazer, A. Ramazani, M.A. Kashi, J. Zavašnik, "Developing high coercivity in large diameter cobalt nanowire arrays", *J. Phys. D: Appl. Phys*, **49** (2016) 445001.
[۷] F. Noori, A. Ramazani, M.A. Kashi, "Controlling structural and magnetic properties in CoNi and CoNiFe nanowire arrays by fine-tuning of Fe content", *J. Alloys Compd.*, **756** (2018) 193-201.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تأثیر روش ساخت بر ریزساختار و خواص فیزیکی نانوکامپوزیت گرافن/گرافن اکسید مغناطیسی

زونیا، مریم[۱]؛ حکیمی، محسن[۱]؛ زارع، حکیمه[۱]؛صمدزاده یزدی، محمدرضا[۲]؛ امیری، احد[۱]

[۱] دانشکده فیزیک ، دانشگاه یزد، یزد، ایران

[۲] دانشکده مهندسی معدن و متالورژی، دانشگاه یزد، یزد، ایران

چکیده

گرافن اکسید به دلیل داشتن مساحت سطح بالا و گروه‌های عاملی اکسیژنی به عنوان نامزد مناسبی برای ساخت نانوکامپوزیت‌ها در کاربردهای گوناگون، از جمله حذف آلاینده‌ها بسیار مورد توجه قرار گرفته است. در این تحقیق گرافن اکسیدها طی دو فرایند متفاوت ساخته شدند و سپس با روش هم‌رسوبی مغناطیسی شدند. نمونه‌ها توسط آنالیزهای طیف‌سنجی رامان، طیف‌سنجی فروسرخ تبدیل فوریه، پراش پرتو ایکس و میکروسکوپ الکترونی روبشی نشر میدانی مورد بررسی قرار گرفتند.

واژه های کلیدی: *گرافن اکسید، نانوکامپوزیت‌های مغناطیسی، نانوذرات آهن.*

Influence of synthesis method on the microstructure and physical properties of magnetic graphene/graphene oxide nanocomposite

Zounia, Maryam[1]; Hakimi Baghdabadi, Mohsen[1]; Zare, Hakimeh[1]; Samadzadeh Yazdi, Mohamad Reza[2]; Amiri, Ahad[1]

[1]Department of Physics, Yazd University, Yazd, Iran
[2]Mining and Metallurgical Engineering Department, Yazd University, Yazd, Iran

Abstract

Graphene oxide is of great interest as a suitable candidate for synthesis of nanocomposites in various applications, including the removal of pollutants, due to its high surface area and oxygen functional groups. In this research, graphene oxides were synthesized in two different processes and then magnetized by co-precipitation method. The samples were analyzed by Raman spectroscopy, Fourier transform infrared spectroscopy, X-ray diffraction, and field emission scanning electron microscope.

***Keywords**: Graphene Oxide, Magnetic Nanocomposites, Iron Oxide Nanoparticles.*

مقدمه

گرافن اکسید (GO)، ماده مشتق اکسیدی گرافن است که از شبکه کربنی مبتنی بر حلقه‌های شش ضلعی با اتم‌های کربن هیبرید شده sp^2و sp^3 در ساختار دو بعدی تشکیل شده است. گرافن اکسید حاوی گروه‌های عاملی اکسیژنی فراوانی مانند گروه‌های اپوکسی، هیدروکسیل، کربونیل و کربوکسیل در سطوح و لبه‌ها است. این گروه‌های عاملی، باعث ایجاد بار منفی، آب دوستی و پراکندگی آسان GO در محلول‌های آبی می‌شوند. این ویژگی‌ها، GO را به یک نامزد عالی برای حذف آلاینده‌های مختلف تبدیل کرده است. با این حال، GO به عنوان جاذب دارای معایبی است. برای نمونه، GO به دلیل پخش‌پذیری بالا در آب و همچنین کوچک بودن اندازه ذرات، جدا کردن آنها از محلول‌های آبی، آسان نیست. به همین دلیل، کاربرد عملی و جداسازی GO پس از فرآیند جذب مشکل است. در سال‌های اخیر، گرافن اکسید مغناطیسی به دلیل جداسازی مغناطیسی آسان جاذب از محلول‌های آبی و توانایی بالا در تصفیه آلاینده‌ها از آب در بازه زمانی کوتاه توجه زیادی را به خود جلب کرده است[1, 2]. با توجه به مساحت سطح بالا و وجود گروه‌های عاملی، GO می‌تواند به عنوان بستری مناسب برای رشد نانوذرات مختلف از جمله نانوذرات مگنتیت (Fe_3O_4) مورد استفاده قرارگیرد. گروه‌های عاملی اکسیژنی به عنوان مکان‌های فعال برای هسته‌سازی و رشد پیش‌ماده‌های آهن برای

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تشکیل نانوکامپوزیت‌های مغناطیسی عمل می‌کنند. در سال‌های اخیر، نانوذرات Fe_3O_4 به دلیل داشتن ویژگی‌های منحصر به فردی مانند ساخت آسان، پایداری بالا و جداسازی راحت از محلول‌های آبی توسط میدان مغناطیسی خارجی، به عنوان پایه‌های جاذب مورد مطالعه قرار گرفته‌اند [3]. در این پژوهش طی دو فرایند متفاوت، نانوکامپوزیت‌های مغناطیسی گرافن/گرافن اکسید ($G/GO@Fe_3O_4$) با دو نمک سدیم مختلف ساخته و مورد بررسی قرار گرفتند.

آزمایش‌ها

ساخت ترکیب گرافن/گرافن اکسید (G/GO)

ترکیب G/GO به روش هامرز اصلاح شده با دو فرایند متفاوت ساخته شد. برای ساخت ترکیب گرافن/گرافن اکسید نوع ۱ **(G/GO_1)**، ابتدا ۰/۳۸گرم گرافیت با ۰/۷۶ گرم کلرید سدیم در حمام یخ مخلوط شد و سپس در حین هم‌زدن، ۸/۷ میلی‌لیتر سولفوریک اسید اضافه شد. دما در این مرحله کمتر از ^oC ۱۲ نگه داشته‌شد. پس از حدود ۱۰ دقیقه هم‌زدن، ۱/۳ گرم پتاسیم پرمنگنات اضافه شد. سپس با اضافه کردن ۳۸ میلی‌لیتر آب، تغییر رنگ محلول به قهوه‌ای دیده‌شد. پس از آن هم‌زدن ۳۰ دقیقه در دمای ^oC ۳۰ ادامه یافت و سپس با افزودن پراکسید هیدروژن واکنش متوقف شد. محصول نهایی پس از فیلتر، با هیدروکلریک اسید و آب شسته شد و در گرمکن در دمای ^oC ۸۰ به مدت ۱۰ساعت خشک شد[3].

برای ساخت ترکیب گرافن/گرافن اکسید نوع ۲ **(G/GO_2)**، ۱/۲گرم گرافیت با ۲ گرم نیترات سدیم در حمام یخ مخلوط شد و سپس در حین هم‌زدن ۵۰ میلی لیتر سولفوریک اسید اضافه شد. دما در این مرحله بین ^oC ۸ تا ^oC ۱۲ تنظیم شد. پس از حدود ۱۰ دقیقه هم‌زدن، ۶ گرم پتاسیم پرمنگنات اضافه شد. پس از ۲ ساعت هم‌زدن، ۱۰۰ میلی‌لیتر آب اضافه شد و تغییر رنگ محلول به قهوه‌ای مشاهده شد. پس از آن هم‌زدن ۳۰ دقیقه در دمای ^oC۳۰ ادامه یافت و سپس با اضافه کردن پراکسیدهیدروژن واکنش متوقف شد. پس از سانتریفیوژ با هیدروکلریک اسید و آب شسته شد و در گرمکن در دمای ^oC ۸۰ به مدت ۱۰ساعت خشک شد[4].

در ساخت دو نوع ترکیب G/GO علاوه بر تفاوت در نوع نمک سدیم و میزان سولفوریک اسید استفاده شده، زمان واکنش پس از اضافه کردن پتاسیم پرمنگنات نیز متفاوت بود.

ساخت نانوکامپوزیت‌های $G/GO@Fe_3O_4$

مغناطیسی کردن ترکیب G/GO، به روش هم‌رسوبی انجام‌شد. به این ترتیب، ابتدا کلریدهای آهن $FeCl_3.6H_2O$ و $FeCl_2.4H_2O$ با نسبت استوکیومتری ۲ به ۱ در ۱۵۰میلی‌لیتر آب بدون یون حل شده و به مدت ۳۰ دقیقه تحت همزدن قرار گرفت. هم‌زمان ۰/۲ گرم ترکیب گرافن/گرافن اکسید در ۱۲۰میلی‌لیتر آب بدون یون پخش شد و سپس محلول کلریدهای آهن، آهسته به محلول گرافن/گرافن اکسید اضافه شد. سپس دما تا ^oC ۸۰ افزایش یافت. با اضافه کردن محلول آمونیاک به صورت قطره قطره، pH محلول به ۱۱ رسانده شد. پس از آن مخلوط برای یک ساعت دیگر به هم‌زده شد. پس از جداسازی به وسیله مگنت، محصول نهایی با آب بدون یون شسته شد و در گرمکن خشک شد[5].

دستگاه‌های مشخصه‌یابی نانوکامپوزیت‌ها

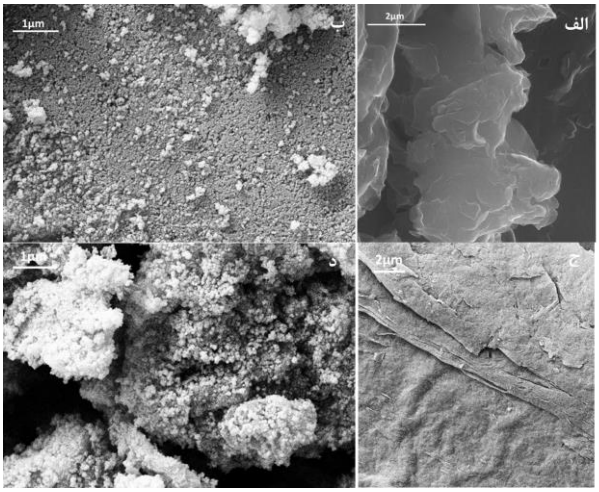
مورفولوژی نمونه‌های ساخته‌شده با میکروسکوپ‌های الکترونی روبشی گسیل میدان (FE-SEM ZEISS Sigma 300) و (FE-SEM TESCAN MIRA3) تعیین شد. طیف‌های رامان نمونه‌ها توسط طیف‌سنج رامان (Takram N1) ثبت شد. الگوهای پراش پرتو ایکس (XRD) نمونه‌ها با استفاده از پراش‌سنج (Bruker d8) مجهز به منبع Cu Ka بدست آمد. طیف‌های مادون قرمز تبدیل فوریه (FT-IR) نمونه‌ها با استفاده از طیف‌سنج Bruker Equinox 55 ثبت شد.

نتایج و بحث

برای بررسی مورفولوژی و جزئیات اندازه نمونه‌ها از FESEM استفاده شد. از تصاویر FESEM شکل۱ (الف و ج)، می‌توان مشاهده کرد که ساختار ترکیب‌های G/GO_1 و G/GO_2 به صورت صفحات دو بعدی است. همچنین تصاویر نانوکامپوزیت‌های $G/GO_1@Fe_3O_4$ و $G/GO_2@Fe_3O_4$ شکل۱ (ب و د)، نشان می‌دهند که نانوذرات Fe_3O_4 به شکل یکنواخت سطح صفحات ترکیب G/GO را پوشانده‌اند. اندازه اکثر ذرات $G/GO_1@Fe_3O_4$ در گستره ۱۵ تا ۵۰ نانومتر است. در حالی که برای

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$G/GO_2@Fe_3O_4$ اندازه اکثر ذرات کوچک‌تر و بین ۱۰ تا ۵۰ نانومتر تخمین زده می‌شود.



شکل ۱ : تصاویر FESEM (الف) G/GO_1،(ب) $G/GO_1@Fe_3O_4$، (ج) $G/GO_2@Fe_3O_4$(د)، G/GO_2

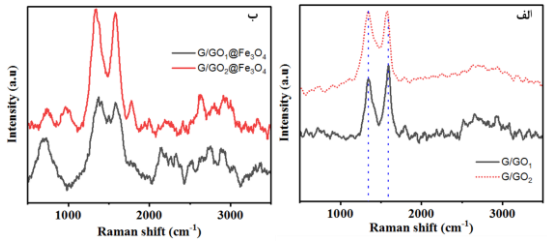
طیف‌سنجی رامان ابزاری قوی و مهم برای مشخص‌کردن مواد کربنی و آرایش متمایز ساختارهای بلوری کربن است. در طیف رامان هر دو نوع G/GO (شکل۲(الف)) دو قله برجسته مربوط به نوارهای D و G به ترتیب در محدوده‌ی cm^{-1} ۱۳۴۷ و ۱۵۹۴ برای G/GO_1 و در محدوده‌ی cm^{-1} ۱۳۴۲ و ۱۵۷۴ برای G/GO_2 مشاهده می‌شود. علاوه بر تفاوتی که در محل قله‌ها در دو نوع ترکیب دیده می‌شود، نسبت I_D/I_G به عنوان معیاری برای درجه اکسیداسیون، برای G/GO_1، ۰/۸۹ و برای G/GO_2، ۰/۹۹ بدست آمد که نشان می‌دهد درجه اکسیداسیون صفحات گرافنی در G/GO_2 بیشتر است. طیف رامان نانوکامپوزیت‌های $G/GO_1@Fe_3O_4$ و $G/GO_2@Fe_3O_4$ در شکل (۲ب) نشان داده شده است. در هر دو طیف، پوشش موفقیت‌آمیز GO با نانوذرات Fe_3O_4 با افزایش شدت قله D نسبت به G و همچنین افزایش شدت نوارهای در محدوده cm^{-1} ۲۷۰۰-۲۹۰۰ نسبت به ترکیب‌های G/GO، به دلیل کاهش گروه‌های اکسیژنی سطح گرافن/گرافن اکسیدها، مشهود است[6].

برای مطالعه ساختار و ویژگی‌های بلوری و شناسایی فازها از نمونه‌های ساخته شده آنالیز XRD گرفته‌شد. طیف‌سنجی XRD به عنوان روشی قدرتمند برای شناسایی ساختار بلوری و خلوص فاز نمونه‌ها استفاده می‌شود. از الگوهای XRD ترکیب G/GO (شکل۳ الف)، مشاهده می‌شود الگوی پراش G/GO_2 یک قله پراش تیز در $2\theta=11/3^o$ وجود دارد. فاصله‌ی بین صفحات بر اساس رابطه براگ ۷/۹Å محاسبه شد. این فاصله بین لایه‌ای به دلیل تشکیل گروه‌های عاملی مختلفی مانند گروه‌های اپوکسی، کربوکسیل و کربونیل در طی فرایند اکسیداسیون GO ایجاد شده‌اند. افزودن مولکول‌های H_2O و گروه‌های عاملی اکسیژن همچنین باعث می‌شود که این فاصله گسترده‌تر شود. در الگوی پراش G/GO_1، قله پراش در حدود $2\theta=12/1^o$ ۲ مربوط به چند لایه‌های گرافن/گرافن اکسید با فاصله‌ای حدود Å ۷/۳ مشاهده می‌شود. فاصله بین صفحات با میزان گروه‌های عاملی ایجاد شده متناسب است. به نظر می‌رسد، G/GO_1 که فاصله بین صفحات کمتری دارد، میزان گروه‌های عاملی کمتری در سطح آن تشکیل شده است. در هر دو الگوی پراش ترکیب‌های G/GO_1 و G/GO_2، قله‌های مربوط به گرافیت در $2\theta=26/6^o$ و برخی ناخالصی‌های دیگر دیده می‌شوند. همانطور که در الگوهای پراش $G/GO_1@Fe_3O_4$ و $G/GO_2@Fe_3O_4$ مشاهده می‌شود، قله‌های پراش در زوایای ۳۰/۲، ۳۵/۵، ۴۳/۲، ۵۳/۶، ۵۷/۲ و ۶۲/۷ درجه مربوط به صفحات بلوری (۲۲۰)، (۳۱۱)، (۴۰۰)، (۴۲۲)، (۵۱۱) و (۴۴۰) است که مطابق با ساختار بلوری شبکه مکعبی مرکز وجهی (FCC) نانوذرات Fe_3O_4 می‌باشد. عدم وجود قله پراش در $2\theta=12/1^o$ در الگوی پراش $G/GO_1@Fe_3O_4$ و کاهش شدت قله پراش گرافن/گرافن اکسید در $G/GO_2@Fe_3O_4$ و جابه‌جایی آن به $\theta=11/6^o$ ۲، نشان دهنده پوشش نانوذرات بر روی سطح ترکیب G/GO است. اندازه میانگین بلورک‌های $G/GO_1@Fe_3O_4$، بر اساس رابطه دبای شرر، حدود ۱۹ نانومتر و اندازه میانگین بلورک‌های $G/GO_2@Fe_3O_4$، حدود ۱۵ نانومتر محاسبه شد. گروه‌های عاملی اکسیژنی به عنوان مراکز هسته‌زایی عمل می‌کنند. افزایش گروه‌های عاملی سرعت هسته‌زایی را افزایش می‌دهد و با افزایش سرعت هسته‌زایی، رشد هسته‌ها محدود می‌شود و در نتیجه ذرات نهایی کوچک‌تری تشکیل می‌شود.

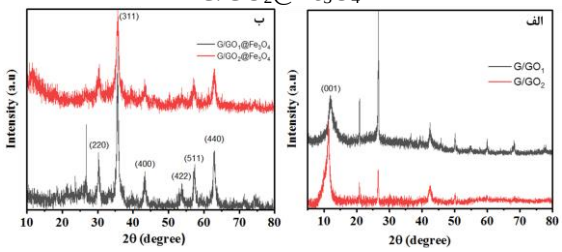
برای شناسایی گروه‌های عاملی ایجاد شده و پیوندهای شیمیایی در سطح نمونه‌ها از FT-IR استفاده شد. در طیف‌های FT-IR ترکیب

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

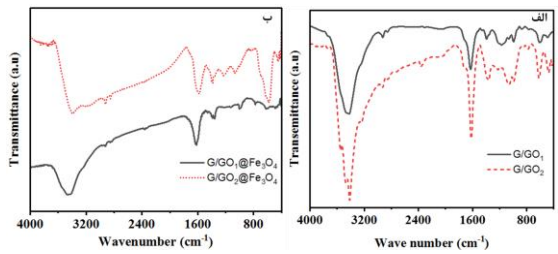
G/GO نشان داده شده در شکل (۴الف)، قله‌های واقع در cm^{-1} ۱۷۲۰،۱۶۲۷،۱۰۶۰،۱۱۷۰ به ترتیب مربوط به گروه‌های C=C ,C-O, C-OH و C=O است. علاوه‌براین، قله در محدوده‌ی cm^{-1} ۳۴۴۰ متعلق به گروه عاملی هیدروکسیل بر روی سطح گرافن اکسید است. شدت نوار مربوط به پیوند C-O در طیف FT-IR نمونه‌ی G/GO_2بیشتر از شدت آن در نمونه G/GO_1 است که با نتایج آنالیزهای دیگر مطابقت دارد. در طیف نانوکامپوزیت‌های $G/GO_1@Fe_3O_4$ و $G/GO_2@Fe_3O_4$ شکل (۴ب)، نواری در محدوده‌ی cm^{-1} ۵۸۰ قرار دارد که به پیوند Fe-O نسبت داد. علاوه بر این جابجایی قله در cm^{-1} ۱۷۲۰، پس از واکنش، به cm^{-1} ۱۶۹۲ نشان می‌دهد نانوذرات Fe_3O_4 به سطح G/GO با پیوند کووالانسی متصل شده‌اند.



شکل۲ : طیف‌های رامان(الف) G/GO_1، G/GO_2، (ب) $G/GO_1@Fe_3O_4$ ، $G/GO_2@Fe_3O_4$



شکل۳ : الگوهای پراش پرتوX (الف) G/GO_1، G/GO_2، (ب) $G/GO_1@Fe_3O_4$، $G/GO_2@Fe_3O_4$



شکل۴ : طیف‌های FT-IR ، (الف) G/GO_1، G/GO_2، (ب) $G/GO_1@Fe_3O_4$، $G/GO_2@Fe_3O_4$

نتیجه گیری

نتایج نشان می‌دهد ساخت هر دو نوع گرافن/گرافن اکسید موفقیت آمیز بوده است. ولی میزان اکسیداسیون در ترکیب G/GO_2 بیشتر بوده و بنابراین فاصله بین صفحات ایجاد شده، با اتصال گروه‌های اکسیژنی بیشتر بر سطح صفحات، افزایش داشته‌است. همچنین پوشش صفحات گرافن/گرافن اکسید با نانوذرات مگنتیت در هر دو نوع کامپوزیت به خوبی صورت گرفته‌است، ولی به دلیل متفاوت بودن روش ساخت گرافن/گرافن اکسیدها، اندازه نانوذرات در نانوکامپوزیت $G/GO_2@Fe_3O_4$ کمتر از نانوکامپوزیت $G/GO_1@Fe_3O_4$ است. کاهش اندازه ذراتی که یک وزن معین را تشکیل می‌دهند، تعداد ذرات را در آن وزن افزایش می‌دهد و با افزایش مساحت سطح واکنش‌دهنده منجر به افزایش سرعت واکنش می‌شود. بنابراین کاربرد آن را در جذب سطحی مؤثرتر می‌سازد.

مرجع‌ها

[1] M. S. Raghu, K. Yogesh Kumar, M. K. Prashanth, B. P. Prasanna, R. Vinuth, and C. B. Pradeep Kumar, "Adsorption and antimicrobial studies of chemically bonded magnetic graphene oxide-Fe3O4 nanocomposite for water purification," *J. Water Process Eng.*, vol. 17, no. March, pp. 22–31, 2017.

[2] L. T. M. Thy, P. M. Cuong, T. H. Tu, H. M. Nam, N. H. Hieu, and M. T. Phong, "Fabrication of magneticiron oxide/graphene oxide nanocomposites for removal of lead ions from water," *Chem. Eng. Trans.*, vol. 78, pp. 277–282, 2020.

[3] N. K. Rukman, M. Jannatin, G. Supriyanto, M. Z. Fahmi, and W. A. W. Ibrahim, "GO-Fe 3 O 4 Nanocomposite from coconut shell: Synthesis and characterization," *IOP Conf. Ser. Earth Environ. Sci.*, vol. 217, p. 012008, Jan. 2019.

[4] S. Kumari *et al.*, "A Novel Synthesis of the Graphene Oxide-Silver (GO-Ag) Nanocomposite for Unique Physiochemical Applications," *ACS Omega*, vol. 5, no. 10, pp. 5041–5047, 2020.

[5] Ş. Saçmacı and M. Saçmacı, "Highly selective adsorption of cadmium ions by water-dispersible magnetic thioglycolic acid/graphene oxide composites," *Appl. Organomet. Chem.*, vol. 32, no. 9, pp. 1–11, 2018.

[6] M. S. Raghu, K. Y. Kumar, M. K. Prashanth, B. P. Prasanna, R. Vinuth, and C. B. P. Kumar, "Journal of Water Process Engineering Adsorption and antimicrobial studies of chemically bonded magnetic graphene oxide-Fe_3O_4 nanocomposite for water purification," *J. Water Process Eng.*, vol. 17, pp. 22–31, 2017.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

همبستگی مرتبه N فوتون-فوتون در نور گسیل شده از دو اتم متفاوت با برهم کنش دوقطبی قوی

منیری، سید مصطفی [۱] ؛ دارششدر، الناز [۲]

[۱] گروه علوم پایه، دانشکده فنی مهندسی گلپایگان، دانشگاه صنعتی اصفهان، گلپایگان، ۶۷۴۹۷-۸۷۷۱۷

[۲] دانشکده فیزیک، دانشگاه کردستان، سنندج، ۱۶۱۷۵-۶۶۱۷۷

چکیده

در این تحقیق، همبستگی مرتبه N فوتون-فوتون و ویژگی‌های هدایت کنندگی (heralding properties) در نور پراکنده شده توسط دو گسیل کننده‌ی نوری متفاوت بررسی می‌شوند. همبستگی‌ها و فرآیندهای جهشی (leapfrog) N-فوتونی، با معرفی حالت‌های پوشیده (dressed states) جمعی تفسیر می‌شوند. حالت‌های پوشیده به دلیل وادنیدگی متفاوت گسیل کننده‌ها، حاوی حالت پادمتقارن اتمی هستند. حالت اتمی پادمتقارن نرخ گسیل بسیار پایینی دارد، که منجر به همبستگی‌های فوتونی طولانی مدت (long-lived) برای فوتون‌های گسیل شده‌ای که از این حالت عبور می‌کنند می‌شود. همبستگی قوی طولانی مدت نه تنها در فوتون های حقیقی در گذارهای حقیقی، بلکه در فوتون های مجازی مربوط به گسیل‌های مشارکتی (joint emissions) نیز دیده می شود. این موضوع اتم‌های متفاوت گسیل کننده نوری را به کاندیداهای مناسبی برای تولید تک فوتون‌ها یا بسته‌های N فوتونی با همبستگی قوی طولانی مدت معرفی می‌کند.

واژه های کلیدی: ***اتم دو ترازی، همبستگی فوتون-فوتون***

N^{th} order photon-photon correlations for the light emitted from two strongly interacting non-identical emitters

Moniri, Seyed Mostafa[1]; Darsheshdar, Elnaz[2]

[1] Basic Sciences Group, Golpayegan College of Engineering, Isfahan University of Technology, Golpayegan 87717-67498, Iran
[2] Department of Physics, University of Kurdistan, P.O. Box 66177 15175, Sanandaj, Iran

Abstract

We investigate N^{th} order (N > 2) photon-photon correlations and properties of heralded single and bundles of photons for the light emitted from two strongly interacting non-identical emitters. Collective dressed states, where in non-identical emitters contain the component of anti-symmetric atomic state coupled with light mode, are able to describe various photon correlations containing various N^{th} photon real and joint emissions. We show that the heralding scenario for two non-identical interacting atoms has the advantage of long lived strong correlations due to the participation of anti-symmetric atomic state in the dressed levels which is an advantage over single or two identical interacting atoms. Our study shows this property in both the case of real processes, where the photons are associated with specific resonances, and virtual processes, where pairs of photons are emitted jointly.

***Keywords**: Two- level atom, photon-photon correlations*

PACS No. 32

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مقدمه

نور پراکنده شده توسط گسیل کننده های کوانتومی برانگیخته به عنوان منبع انواع مختلف نور در اپتیک کوانتومی از اهمیت زیادی برخوردار بوده و موضوع بسیاری از پژوهش‌ها بوده است. همبستگی های فوتون با تفکیک فرکانس (frequency-resolved) طیف فلورسنت این سامانه‌ها به طور گسترده به صورت تئوری و تجربی مورد مطالعه قرار گرفته است. در این پژوهش‌ها نشان داده شده است که این طیف منبعی از همبستگی‌های کوانتومی و کلاسیک است. طیف فلورسنت دارای یک قله در میدان لیزر ضعیف است که در حضور یک میدان قوی به یک قله مرکزی و دو قله جانبی تبدیل می‌شود [۱]. برهمکنش دوقطبی-دوقطبی با واسطه نور منجر به برانگیختگی و یا واپاشی مشارکتی می‌شود. بنابراین، طیف فلورسنت اتم‌های در معرض میدان قوی، نوارهای جانبی جدیدی را نشان می‌دهد که برای یک برهمکنش ضعیف، در فرکانس دو برابر رابی ظاهر می‌شوند. اثر برهمکنش قوی بین اتم‌ها بر همبستگی فوتون-فوتون قله‌های مختلف طیف فلورسانس اخیراً بر اساس توصیف کامل حالات انرژی پوشیده جمعی مورد مطالعه قرار گرفته است [۲] و نشان داده شده است نوارهای جانبی جدید در طیف فلورسنت ظهور اثرات جمعی بر می گردد. چنین اثرات جمعی در فیزیک دو فوتونی که بین قله‌ها وجود دارد، به دلیل انتقال‌های مجازی، به نام انتقال جهشی، ظاهر می‌شوند. در این تحقیق، همبستگی مرتبه N فوتون-فوتون در نور پراکنده شده توسط دو گسیل کننده‌ی نوری متفاوت بررسی می‌شوند.

معرفی سامانه‌ی تحت مطالعه

مطالعه سامانه‌ای متشکل از دو اتم متفاوت، که در معرض یک پرتو لیزر خارجی هستند، و به دلیل برهمکنش دوربرد ایجاد شده توسط نور، تحت تابش جمعی قرار می‌گیرند، توسط معادله مادر انجام می‌شود. در این پژوهش ما اتم‌های دو ترازی برهمکنشی متفاوت را در نظر می‌گیریم که هر یک از آنها با روابط جبری اسپین ۱/۲ در مکان‌های $\mathbf{r}_i$ و با نرخ گسیل‌های Γ_i توصیف می‌شوند. معادله اصلی متناظر در تقریب‌های بورن، مارکو و موج چرخان به صورت زیر بیان می‌شود[۳]:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=i[\rho,H_\sigma]+\mathcal{L}_\sigma\rho, \qquad (۱)$$

که در آن هامیلتونی بصورت زیر است:

$$H_\sigma=\sum_i H_{\sigma i}+\sum_{i,j\neq i}H_{\sigma ij}=\frac{\Omega}{2}\sum_i(e^{-i\mathbf{k}.\mathbf{r}_i}\sigma_i^-+e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}_i}\sigma_i^+) \qquad (۲)$$
$$+\sum_i\Delta_i\sigma_i^+\sigma_i^--\sum_{i,j\neq i}\sqrt{\Gamma_i\Gamma_j}\Omega_{ij}\sigma_i^+\sigma_j^-,$$

و لیندبلادین با معادله زیر بیان می‌شود:

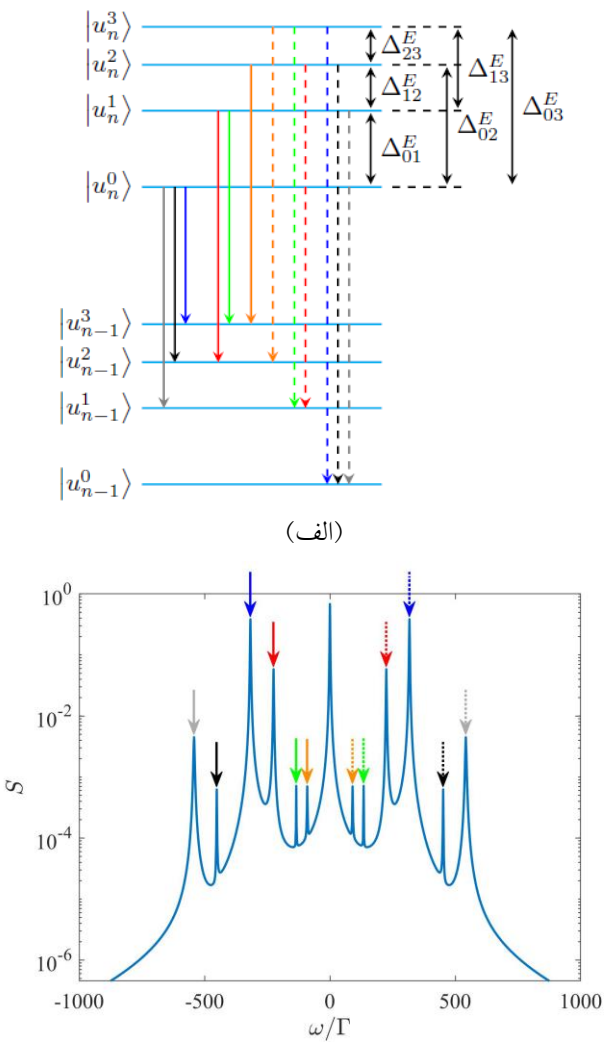
$$\mathcal{L}_\sigma\rho=\frac{1}{2}\sum_i\Gamma_i\mathcal{L}_{\sigma_i}\rho+\frac{1}{2}\sum_{i,j\neq i}\sqrt{\Gamma_i\Gamma_j}\Gamma_{ij}\mathcal{L}_{\sigma_{ij}}\rho$$
$$=\frac{1}{2}\sum_i\Gamma_i(2\sigma_i^-\rho\sigma_i^+-\sigma_i^+\sigma_i^-\rho-\rho\sigma_i^+\sigma_i^-) \qquad (۳)$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{i,j\neq i}\sqrt{\Gamma_i\Gamma_j}\Gamma_{ij}(2\sigma_j^-\rho\sigma_i^+-\sigma_i^+\sigma_j^-\rho-\rho\sigma_i^+\sigma_j^-).$$

در معادلات فوق ρ ماتریس چگالی و σ_i^- (σ_i^+) عملگر نابودی (خلق) اتم دو ترازی با انرژی آزاد ω_{ai}است. وادنیدگی، تفاوت بین ω_{ai} و فرکانس لیزر است که با $\Delta_i=\omega_{ai}-\omega_L$ نشان شده‌است. فرکانس رابی میدان و بردار موج لیزر به ترتیب با Ω و $\mathbf{k}$ نشان داده شده‌اند. هامیلتونی سیستم در دستگاه چرخان با فرکانس لیزر نوشته شده و عبارت اول مربوط به برهمکنش اتم-میدان و عبارت دوم مربوط به برهمکنش اتم-اتم است. همچنین θ_{ij} زاویه بین جهت گشتاورهای دوقطبی اتم‌ها و خطی که آنها را بهم وصل می‌کند، است. فاصله بین اتم‌ها بصورت $r_{ij}=|\mathbf{r_i}-\mathbf{r_j}|$ تعریف می‌شود. برهمکنش دوقطبی-دوقطبی بین اتم‌ها در فواصل کوچک بین اتمی قوی تر است. در این پژوهش فرض می‌کنیم که گشتاورهای دوقطبی اتم‌ها برابر هستند.

در مورد اتم‌های دو ترازی متفاوت در حضور برهمکنش قوی و با وادنیگی‌های مختلف، عبارات تحلیلی برای حالات انرژی پوشیده فقط برای موارد محدود به‌دست می‌آیند [۲]. در این پژوهش یک حالت کلی در نظر می‌گیریم و با قطری سازی عددی هامیلتونی حالت های در هم تنیده میدان-اتم را بدست می‌آوریم. در دو اتم یکسان با برهمکنش قوی، تنها شش قله جانبی در طیف فلورسانس وجود دارند. زیرا حالت اتمی پادمتقارن با سایر

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

حالت‌های در هم تنیده میدان–اتم جفت نمی‌شود [۲]. ولی در موردی که اتم‌ها وادنیدگی یکسان نداشته باشند، دوازده قله جانبی در طیف فلورسانس وجود دارد، زیرا حالت اتمی پادمتقارن با سایر حالت‌های در هم تنیده میدان–اتم جفت می‌شود و با افزایش ترازهای انرژی پوشیده، تعداد گذارها نیز بیشتر می‌شوند.



شکل ۱: الف) ترازهای انرژی پوشیده (چندگانه‌ها) برای دو اتم متفاوت. ب) طیف فلورسانس برای دو اتم متفاوت. گذارهای مختلف با رنگهای مختلف نشان داده شده‌اند و پیک مربوط به هر گذار با رنگ مربوطه در طیف فلورسانس مشخص شده است. نتایج عددی طیف در مقادیر عددی $\Omega = 250\Gamma$، $kr_{12} = 0.004$، $\Delta_1 = 50\Gamma$، $\Delta_2 = 100\Gamma$ و $\theta_{12} = \cos^{-1}(1/\sqrt{3})$ رسم شده‌اند.

مرتبه دوم همبستگی فوتون‌ها

اکنون همبستگی‌های خاصی که بین فوتون‌های ناشی از گذارهای مختلف وجود دارند را مطالعه می‌کنیم.

در حالی که انتقال از یک چندگانه به چندگانه بعدی منشأ طیف تک فوتونی مانند طیف فلورسانس است، همبستگی‌ها در فوتون‌های ساطع شده از طیف فلورسانس منشأ همبستگی مرتبه دوم فرکانسی تفکیک شده یا $g^{(2)}_{1,1,s}(\omega_1,\omega_2,\tau)$ است. این همبستگی ها با استفاده از روش حسگر ها [٤] به صورت عددی محاسبه می‌شوند. در این روش با افزودن دو حسگر که بصورت اتم دو ترازی در نظر گرفته می‌شوند، همبستگی بین حسگرها محاسبه می‌شود. در واقع همبستگی بین حسگرها همان همبستگی بین فوتون های شناسایی شده توسط آن‌هاست:

$$g^{(2)}_{1,1,s}(\omega_1,\omega_2,\tau) = \frac{\left\langle :\xi_1^\dagger(\omega_1,t)\xi_2^\dagger(\omega_2,t+\tau)\xi_2(\omega_2+\tau)\xi_1(\omega_1,t):\right\rangle}{\left\langle \xi_1^\dagger(\omega_1,t)\xi_1(\omega_1,t)\right\rangle\left\langle \xi_2^\dagger(\omega_2,t)\xi_2(\omega_2,t)\right\rangle} \quad (3)$$

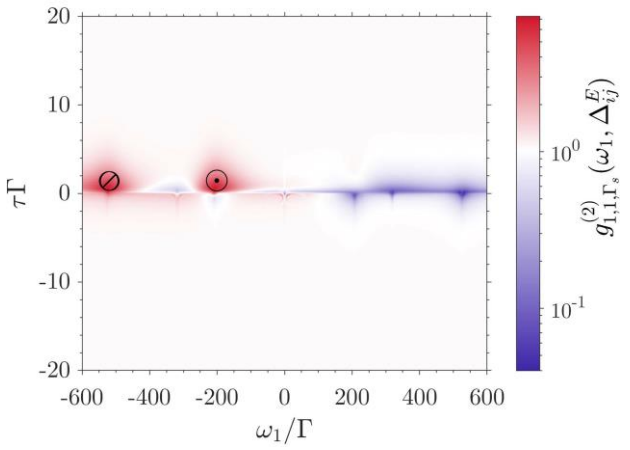
در رابطه بالا $\xi_1^\dagger(\omega_1,t)$ عملگر مربوط به حسگر اول با فرکانس ω_1 و $\xi_2^\dagger(\omega_2,t)$ عملگر مربوط به حسگر اول با فرکانس ω_2 است. عبارت $g^{(2)}_{1,1,s}(\omega_1,\omega_2,\tau)$ بیانگر همبستگی مرتبه دوم است و اندیس آن نشان می دهد که رابطه ارایه شده، مربوط به همبستگی بین یک فوتون در فرکانس ω_1 و یک فوتون در فرکانس ω_2 است.

در شکل (۲ الف)، همبستگی $g^{(2)}_{1,1,s}(\omega_1,\Delta^E_{03},\tau)$ برای دو اتم یکسان با برهمکنش قوی نشان داده شده است. همچنین همبستگی $g^{(2)}_{1,1,s}(\omega_1,\Delta^E_{02},\tau)$ مربوط به وضعیت شکل (۱) در شکل (۲ ب) نشان شده است که پیچیدگی آن نشان دهنده تنوع در همبستگی‌های فوتون– فوتون است. توجه داشته باشید که برای دو اتم یکسان با برهمکنش قوی، گذار با فرکانس Δ^E_{02} بی معنی است زیرا حالت اتمی پادمتقارن $\left|u_n^{2a}\right\rangle$ با سایر حالت‌های در هم تنیده میدان–اتم جفت نمی‌شود و $\left|u_n^{2a}\right\rangle$ نمی‌تواند در گذارها شرکت کند.

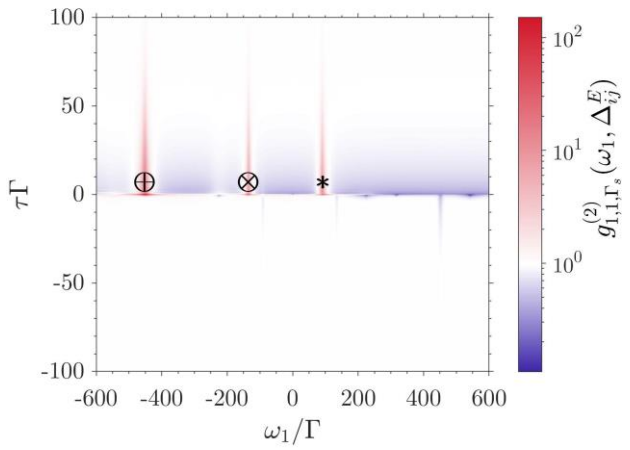
وجود حالت اتمی پادمتقارن در بین حالات پوشیده شده که منجر به همبستگی قوی طولانی مدت در $\tau \gg 0$ می‌شود را می توان در

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

همبستگی سه جفت فوتون دسته شده (به رنگ قرمز تیره) در شکل (۲ ب) دید. این سه جفت فوتون با علامتهای ⊕، ⊗ و * در شکل (۲ ب) مشخص شده‌اند. گذارهای متوالی مربوط به آنها $|u_n^0\rangle \to |u_{n-1}^2\rangle \to |u_{n-2}^0\rangle$، $|u_n^1\rangle \to |u_{n-1}^2\rangle \to |u_{n-2}^0\rangle$ و $|u_n^3\rangle \to |u_{n-1}^2\rangle \to |u_{n-2}^0\rangle$ هستند. هر سه گذار متوالی از $|u_{n-1}^2\rangle$ عبور می‌کنند، بنابراین نرخ گسیل حالت پادمتقارن باعث ایجاد همبستگی‌های فوتون قوی طولانی مدت می‌شود.



(الف)



(ب)

شکل ۲: الف) همبستگی $g_{1,1,s}^{(2)}(\omega_1, \Delta_{03}^E, \tau)$ برای دو اتم یکسان. راست: $g_{1,1,s}^{(2)}(\omega_1, \Delta_{02}^E, \tau)$ برای دو اتم متفاوت را نشان می‌دهد. در دو اتم یکسان $\Delta_1 = \Delta_2 = 50\Gamma$ در نظر گرفته شده است.

گرچه در دو اتم یکسان با برهمکنش قوی در زمان هایی برابر با چندین برابر طول عمر حالت برانگیخته تک اتمی، همبستگی فوتون‌ها از بین نمی‌رود (شکل(۲ ب) را ببینید)، اما همبستگی در زمان‌های بزرگ بسیار کم است و همبستگی قوی فقط تا زمانهای $\tau \sim 3$ وجود دارد. این نکته را می‌توان در دو جفت فوتون دسته بندی شده برای آبشارهای $|u_n^0\rangle \to |u_{n-1}^3\rangle \to |u_{n-2}^0\rangle$ (با علامت ⊘) و $|u_n^1\rangle \to |u_{n-1}^3\rangle \to |u_{n-2}^0\rangle$ (با علامت ⊙) در شکل(۲ ب) مشاهده کرد.

نتیجه گیری

در این پژوهش، با بررسی طیف فلورسنت دو گسیل کننده کوانتومی غیریکسان با برهمکنش قوی، که بر اساس گذارهای ناشی از ساختار حالت‌های پوشیده جمعی تفسیر می شود، نشان دادیم که غیریکسان بودن گسیل کننده‌ها می تواند منبعی برای ایجاد همبستگی های قوی طولانی مدت بین فوتون‌ها در هر دو مورد گسیل‌های مشارکتی و حقیقی باشد. در واقع وجود حالت اتمی پادمتقارن در بین حالات پوشیده و جفت شدگی آن با سایر حالت‌های در هم تنیده میدان-اتم منجر به همبستگی قوی طولانی مدت برای فوتون‌های گسیل شده‌ای که از این حالت عبور می‌کنند می‌شود.

مرجع‌ها

[1] B. R. Mollow, *Phys. Rev.* **188**, 1969 (1969).

[2] E. Darsheshdar, M. Hugbart, R. Bachelard, and C. J. Villas-Boas, *Phys. Rev. A* **103**, 053702 (2021).

[3] G. S. Agarwal, *in Springer Tracts in Modern Physics* (Springer Berlin Heidelberg, 1974).

[4] A. Gonzalez-Tudela, F. P. Laussy, C. Tejedor, M. J. Hartmann, and E. del Valle, *New J. Phys.* **15**, 033036 (2013).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی ویژگی‌های غیرکلاسیکی در برهم‌کنش یک اتم سه ترازی نوع V باحالت همدوس مرتبه M

جعفری ، اکبر[۱] ؛ حیدری، سیدمجید[۱] ؛ عباسی، امید[۲]

[۱] گروه فیزیک ، دانشکده علوم دانشگاه ارومیه، ارومیه

[۲] گروه فیزیک ، دانشگاه آزاد اسلامی واحد نجف آباد، اصفهان

چکیده

اخیراً حالت همدوس مرتبه M با اعمال M مرتبه عملگر تعداد بر روی حالت همدوس استاندارد تعریف شده است. با توجه به اهمیت اثرات تداخل کوانتومی در برهم‌کنش ساختارهای مختلف اتمی با میدان، در این مقاله برهم‌کنش حالت همدوس مرتبه M با یک اتم سه ترازی نوع V مطالعه شده است. به‌علاوه تاثیر مرتبه حالت همدوس در بروز ویژگی‌های غیرکلاسیکی شامل آمارفوتونی زیرپوواسونی و چلاندگی‌های مرتبه اول و مربع دامنه مورد بررسی قرار گرفته است. بروز آمارفوتونی زیرپوواسونی و همچنین چلاندگی مرتبه اول و مربع دامنه به ازای مقادیر مختلف M حالت همدوس، ویژگی‌های غیرکلاسیکی مهم چنین سیستم برهم‌کنشی هستند.

واژه های کلیدی: *حالت همدوس مرتبه M، اتم سه ترازی V-گونه، ویژگی‌های غیرکلاسیکی*

Investigation of nonclassical properties in the interaction of a V-type three-level atom with a Mth coherent state

Jafari, Akbar[1]; Heydari, Seyyed Majid[1]; Abbasi, Omid[2]

[1]*Department of Physics, Science Faculty of Urmia University, Urmia*

[2]*Department of Physics, Islamic Azad University Najafabad Branch, Isfahan*

Abstract

Recently, the Mth coherent state has been defined as the M times applying the number operator on the standard coherent state. Due to the importance of the effects of quantum interference on the interaction of various atomic configurations with the field, in this paper the Mth coherent state interaction with a V-type three-level atom has been studied. In addition the effect of the coherent state order on the occurrence of the nonclassical properties including sub-Poissonian photon statistics and the first order and amplitude-squared squeezing has been investigated. The occurrence of sub-Poissonian photon statistics as well as the first order and amplitude-squared squeezing for different values of M are important nonclassical properties of such an interaction system.

***Keywords**: Mth coherent stat, V-type three-level atom, nonclassical properties*

PACS No. 32

مقدمه

یکی از مدل‌های برهم‌کنشی که در اپتیک کوانتومی مورد توجه قرار گرفته، مدل جینز-کامینگز است. سادگی و حل‌پذیری این مدل باعث شده که در سال‌های اخیر گسترش یابد و تعمیم‌های زیادی از آن ارائه شود. از جمله تعمیم‌هایی که برای این مدل معرفی شده توصیف برهم‌کنش اتم‌های چندترازی از جمله سه ترازی نوع V [۱] و نوع Λ با حالت‌های مختلف میدان می‌باشد[۲]. از طرف دیگر برهم‌کنش سیستم‌های مختلف با حالت‌های مختلف میدان مورد توجه بوده است. یکی از حالت‌های میدان، حالت همدوس مرتبه M است (M مرتبه میدان اولیه اعمالی می‌باشد)[۳]. حالت همدوس مرتبه M حاصل اعمال M بار عملگر تعداد بر روی حالت همدوس استاندارد است. اخیراً برهم‌کنش بین یک اتم دوترازی و میدان تک مد با جفت‌شدگی وابسته به شدت در یک محیط شبه‌کر با در نظر گرفتن میدان اولیه به‌صورت یک حالت همدوس مرتبه M بررسی شده و ویژگی‌های غیرکلاسیکی به ازای مقادیر مختلف M مورد مطالعه قرار گرفته است[۴].

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

در این مقاله برهم‌کنش یک اتم سه ترازی V-گونه درون کاواک با میدان همدوس مرتبه M در حضور جفت‌شدگی وابسته به شدت اتم- میدان بررسی شده است. ضمن بررسی چنین سیستمی به بررسی ویژگی‌های غیرکلاسیکی از جمله آمار زیرپوواسونی (Q) چلاندگی مرتبه اول و مربع دامنه میدان و تاثیر مرتبه M حالت همدوس در بروز این ویژگی‌ها پرداخته‌ایم.

توصیف مدل برهم‌کنشی و حالت همدوس مرتبه M

هامیلتونی سیستم برهم‌کنشی اشاره شده به‌صورت زیر است $(\hbar = c = 1)$:

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^{3} \omega_j \hat{\sigma}_{jj} + \Omega \hat{a}^{\dagger}\hat{a} + \chi \hat{a}^{\dagger 2}\hat{a}^{2} + \lambda_1(\hat{\mathrm{R}}\,\hat{\sigma}_{13} + \hat{\mathrm{R}}^{\dagger}\,\hat{\sigma}_{31}) + \lambda_2(\hat{\mathrm{R}}\,\hat{\sigma}_{23} + \hat{\mathrm{R}}^{\dagger}\,\hat{\sigma}_{32}) \quad (۱)$$

که در این رابطه $\hat{a}$ و $\hat{a}^{\dagger}$ به ترتیب عملگرهای نابودی و خلق فوتونی، χ بخش پراکندگی پذیرفتاری مرتبه سوم محیط غیرخطی شبه‌کر و $\hat{\sigma}_{ij}$ عملگر بالابرنده و پایین‌برنده ترازهای اتمی i و j است که به‌صورت $\hat{\sigma}_{ij} = |i\rangle\langle j|$ تعریف می‌شود. در این مدل میدان الکترومغناطیسی کاواک اپتیکی را تک مد و با فرکانس $\boldsymbol{\Omega}$ و در حضور یک محیط غیرخطی شبه‌کر در نظر می‌گیریم. همچنین ترازهای اتمی را با $|j\rangle$ (j=1,2,3) نشان می‌دهیم که انرژی هر تراز ω_j و گذارها به صورت $|1\rangle \to |3\rangle$ و $|2\rangle \to |3\rangle$ خواهد بود به‌علاوه λ_1 و λ_2 ثابت‌های جفت‌شدگی بین اتم و میدان هستند. جمله اول هامیلتونی مربوط به اتم، جمله دوم هامیلتونی میدان و جمله سوم عبارت غیر خطی مربوط به محیط غیرخطی شبه‌کر است. همچنین دو جمله آخر توصیف‌کننده برهم کنش اتم و میدان هستند. عملگرهای $\hat{R} = \hat{a} f(\hat{\mathrm{n}})$ و $\hat{R}^{\dagger} = f(\hat{\mathrm{n}})\hat{a}^{\dagger}$ برحسب عملگر تعداد فوتونی $\hat{n} = \hat{a}^{\dagger}\hat{a}$ تعریف می‌شوند که تابع $f(\hat{\mathrm{n}})$ منجر به جفت‌شدگی وابسته به شدت اتم- میدان شده و در این مقاله به صورت $f(\hat{\mathrm{n}}) = \frac{1}{\sqrt{n}}$ در نظر گرفته می‌شود. همچنین $\Delta_1 = \omega_3 - \omega_1 + \Omega$ و $\Delta_2 = \omega_3 - \omega_2 + \Omega$ پارامترهای نامیزانی فرکانس میدان و گذارهای اتمی هستند.

تابع موج سیستم $|\psi(\mathrm{t})\rangle$ را برای زمانهای مختلف t به صورت زیر در نظر می‌گیریم:

$$|\psi(\mathrm{t})\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} q_n \{A(\mathrm{n},\mathrm{t})\mathrm{e}^{-i\gamma_1 t}|1,n\rangle + B(\mathrm{n},\mathrm{t})\mathrm{e}^{-i\gamma_2 t}|2,n\rangle + C(\mathrm{n+1},\mathrm{t})\mathrm{e}^{-i\gamma_3 t}|3,n+1\rangle\} \quad (۲)$$

که در این رابطه:

$$\gamma_1 = \omega_1 + n\Omega$$
$$\gamma_2 = \omega_2 + n\Omega \quad (۳)$$
$$\gamma_3 = \omega_3 + (n+1)\Omega$$

با حل معادله شرودینگر $i(\partial/\partial \mathrm{t})|\psi(\mathrm{t})\rangle = \hat{H}|\psi(\mathrm{t})\rangle$ دامنه‌های احتمال اتمی به صورت زیر بدست می‌آیند[۲]:

$$A(\mathrm{n},\mathrm{t}) = \frac{1}{\mathrm{f}_1} e^{i(\Delta_2-\Delta_1)t} \times \sum_{j=1}^{3} \tilde{b}_j [(\mu_j + \mathrm{V}_1) \times (\mu_j + \mathrm{V}_2 + \Delta_2) - \mathrm{f}^2] e^{i\mu_j t} \quad (۴)$$

$$B(\mathrm{n},\mathrm{t}) = \mathrm{f}_2 \sum_{j=1}^{3} \tilde{b}_j e^{i\mu_j t} \quad (۵)$$

$$\mathrm{C}(\mathrm{n+1},\mathrm{t}) = -e^{i\Delta_2 t} \sum_{j=1}^{3} \tilde{b}_j (\mu_j + \mathrm{V}_1) e^{i\mu_j t} \quad (۶)$$

که پارامترهای موجود در معادلات (۴) تا (۶) به‌صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\mathrm{V}_1 = \chi n(\mathrm{n+1}) \quad , \quad \mathrm{V}_2 = \chi n(\mathrm{n-1})$$
$$f_1 = \lambda_1\sqrt{n+1} f(n+1) \; , \; f_2 = \lambda_2\sqrt{n+1} f(n+1) \quad (۷)$$

$$x_1 = 2\mathrm{V}_1 + \mathrm{V}_2 + 2\Delta_2 - \Delta_1$$
$$x_2 = \Delta_2(3\mathrm{V}_1 + \mathrm{V}_2 + \Delta_2 - \Delta_1) + \mathrm{V}_1(\mathrm{V}_1 + 2\mathrm{V}_2 - \Delta_1) - \mathrm{f}^2{}_1 - \mathrm{f}^2{}_2 - \Delta_1\mathrm{V}_2 \quad (۸)$$
$$x_3 = [\Delta_2(\mathrm{V}_1 + \mathrm{V}_2 + \Delta_2 - \Delta_1) + \mathrm{V}_2(\mathrm{V}_1 - \Delta_1) - \mathrm{f}^2{}_1 - \mathrm{f}^2{}_2]\mathrm{V}_1 - \mathrm{f}^2{}_2(\Delta_2 - \Delta_1)$$

$$\mu_i = -\frac{1}{3}x_1 + \frac{2}{3}\sqrt{x_1^{\,2} - 3x_2}\cos[\theta + \frac{2}{3}(j-1)\pi] \quad (۹)$$

به‌طوریکه:

$$\theta = \frac{1}{3}\cos^{-1}\left[\frac{9x_1x_2 - 2x_1^{\,3} - 27x_3}{2(x_1^{\,2} - 3x_2)^{3/2}}\right] \quad (۱۰)$$

$$\tilde{b}_j = \frac{f_1}{\mu_{jk}\mu_{j\ell}} \quad , \quad \begin{matrix} j \neq k \neq \ell = 1,2,3 \\ \mu_{jk} = \mu_j - \mu_k \end{matrix} \quad (۱۱)$$

میدان اعمالی در این سیستم به صورت حالت همدوس مرتبه M است که به‌صورت زیر تعریف می‌شود[۴]:

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$$|M(\alpha)\rangle = N_M \hat{n}^M |\alpha\rangle$$
$$= \frac{e^{-|\alpha|^2/2}}{\sqrt{B_{2M}(|\alpha|^2)}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n^M \alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (۱۲)$$

که در این رابطه N_M ضریب بهنجارش و $B_{2M}(x)$ چندجمله‌ای بل است[۵]. اگر M=0 باشد، میدان اعمالی تبدیل به حالت همدوس معمولی $|\alpha\rangle$ می‌شود و q_n در رابطه (۲) برای حالت همدوس مرتبه M به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$q_n = \frac{e^{-|\alpha_M|^2/2}}{\sqrt{B_{2M}(|\alpha_M|^2)}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n^M \alpha_M^n}{\sqrt{n!}} \quad (۱۳)$$

که در این رابطه داریم:

$$\alpha_M = \exp(\frac{1}{2}\psi(|\alpha|^2+1) - \frac{M}{|\alpha|^2})e^{i\theta} \quad (۱۴)$$

همچنین ψ در عبارت بالا تابع دیگاما است:

$$\psi(z) = \frac{d(\Gamma(z))}{dz} = \frac{\Gamma'(z)}{\Gamma(z)} \quad (۱۵)$$

در ادامه تاثیر مرتبه میدان همدوس را در وقوع ویژگی‌های غیرکلاسیکی مورد بررسی قرار داده‌ایم. در محاسبات عددی به منظور بررسی ویژگی‌های مختلف سیستم برهم‌کنشی، حالت تشدید کامل ($\Delta_1 = \Delta_2 = 0$) در غیاب محیط غیرخطی شبه‌کر ($\chi = 0$) و پارامتر همدوسی $|\alpha| = 5$ در نظر گرفته شده و برای ساده سازی و بدون کم شدن از عمومیت مساله ثابت‌های جفت‌شدگی λ_1 و λ_2 را برابر می‌گیریم.

آمار فوتونی

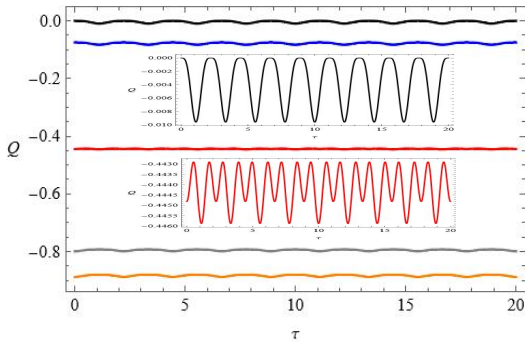
به منظور بررسی آمار فوتونی میدان، پارامتر مندل Q به‌صورت زیر تعریف شده است:

$$Q = \frac{\langle \hat{n}^2 \rangle - \langle \hat{n} \rangle^2}{\langle \hat{n} \rangle} - 1 \quad (۱۶)$$

لازم به ذکر است به ازای $Q\langle 0$ آمار فوتونی زیرپوواسونی به‌عنوان یک ویژگی غیرکلاسیکی حاصل خواهد شد. همچنین به ازای $Q\rangle 0$ آمار فراپواسونی و به ازای $Q = 0$ میدان دارای توزیع پواسوونی همانند توزیع فوتونی یک حالت همدوس خواهد بود. به منظور محاسبه پارامتر مندل Q چشمداشتی‌های $\langle \hat{n} \rangle$ و $\langle \hat{n}^2 \rangle$ به‌صورت زیر محاسبه می‌شوند:

$$\langle \hat{n} \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} P_n \left(n + |C|^2\right)$$
$$\langle \hat{n}^2 \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} P_n \left(n^2 + (2n+1)|C|^2\right) \quad (۱۷)$$

که $P_n = |q_n|^2$ تابع توزیع فوتونی است. در شکل(۱) پارامتر مندل به ازای مقادیر مختلف M بر حسب زمان بهنجارشده $\tau = \lambda t$ رسم شده است. با توجه به نمودار مشخص است که مقدار پارامتر مندل در تمام مدت برهم‌کنش همواره با افزایش M منفی‌تر می‌شود. بنابراین توزیع فوتونی میدان در این سیستم از آمار فوتونی زیرپوواسونی (به عنوان یک ویژگی غیرکلاسیکی) تبعیت می‌کند.



شکل۱ : تحول زمانی پارامتر مندل در برهم کنش اتم با میدان در حالت همدوس مرتبه M بر حسب زمان بهنجارشده $\tau = \lambda t$. نمودار سیاه رنگ برای M=0، آبی M=1، قرمز M=10 ، خاکستری M=50 و نمودار نارنجی برای M=100 می‌باشد.

چلاندگی مرتبه اول

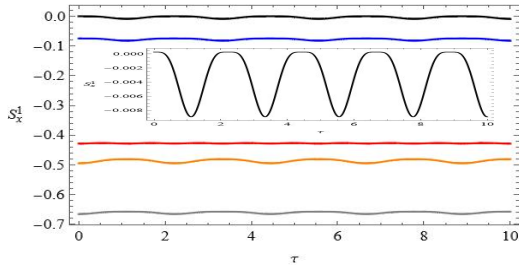
برای بررسی چلاندگی مرتبه اول، دو کوادراتور میدان به‌صورت $\hat{X}_1 = \frac{1}{2}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$ و $\hat{Y}_1 = \frac{1}{2i}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)$ تعریف می‌شوند. با توجه به روابط جابجایی و عدم قطعیت، شرط بروز ویژگی چلاندگی مرتبه اول، تحقق نامساوی $(\Delta\hat{X}_1)^2 \langle \frac{1}{4}$ یا $(\Delta\hat{Y}_1)^2 \langle \frac{1}{4}$ خواهد بود که $\Delta\hat{X}_1$ و $\Delta\hat{Y}_1$ به‌ترتیب عدم قطعیت در کوادراتورهای $\hat{X}_1$ و $\hat{Y}_1$ هستند. این نامساوی‌ها به‌ترتیب به نامعادله‌های زیر منجر می‌شوند:

$$S_X^1 = 2\langle \hat{n} \rangle + \langle \hat{a}^2 \rangle + \langle \hat{a}^{\dagger 2} \rangle - (\langle \hat{a} \rangle + \langle \hat{a}^\dagger \rangle)^2 \langle 0$$
$$S_Y^1 = 2\langle \hat{n} \rangle - \langle \hat{a}^2 \rangle - \langle \hat{a}^{\dagger 2} \rangle + (\langle \hat{a} \rangle - \langle \hat{a}^\dagger \rangle)^2 \langle 0 \quad (۱۸)$$

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

در رابطه فوق عبارت مربوط به چشمداشتی توان‌های مختلف عملگر $\hat{a}$ به‌صورت زیر بدست می‌آید:

$$\langle \hat{a}^r \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} q_n^* q_{n+r} \{ \sqrt{\frac{(n+r)!}{n!}} \times [A^*(n,t)A(n+r,t) + B^*(n,t)B(n+r,t)] + \sqrt{\frac{(n+r+1)!}{(n+1)!}} C^*(n+1,t)C(n+r+1,t) \} \quad (۱۹)$$



شکل۲ : تحول زمانی چلاندگی مرتبه اول؛ پارامترها همانند شکل(۱) است.

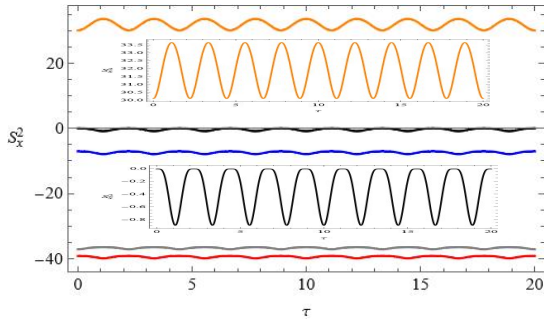
در شکل (۲) تحول زمانی تابع S_X^1 برحسب زمان تعمیم‌یافته و به ازای مقادیر درنظر گرفته شده در شکل (۱) رسم شده است. کاملا مشخص است که با افزایش مرتبه میدان اولیه، ویژگی غیرکلاسیکی چلاندگی مرتبه اول در کوادراتور $\hat{X}_1$ در تمام مدت برهم‌کنش اتفاق می‌افتد. به‌علاوه در حالی‌که با افزایش مرتبه حالت همدوس تا مقدار M=50 میزان چلاندگی نیز افزایش می‌یابد، برای M=100 از میزان چلاندگی کاسته می‌شود.

چلاندگی مربع دامنه

برای بررسی چلاندگی مربع دامنه، کوادراتورهای $\hat{X}_2 = \frac{1}{2}(\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2})$ و $\hat{Y}_2 = \frac{1}{2i}(\hat{a}^2 - \hat{a}^{\dagger 2})$ معرفی می‌شوند. با توجه به روابط جابجایی و عدم قطعیت، ویژگی چلاندگی مربع دامنه با برقراری نامساوی $(\Delta \hat{Y}_2)^2 \langle (\hat{n}+\frac{1}{2}) \rangle$ یا $(\Delta \hat{X}_2)^2 \langle (\hat{n}+\frac{1}{2}) \rangle$ امکان پذیر می‌شود که به‌ترتیب به نامعادله‌های زیر منجر می‌شوند:

$$S_X^2 = 2\langle \hat{n}^2 \rangle - 2\langle \hat{n} \rangle + \langle \hat{a}^4 \rangle + \langle \hat{a}^{\dagger 4} \rangle - (\langle \hat{a}^2 \rangle + \langle \hat{a}^{\dagger 2} \rangle)^2 \langle 0 \quad (۲۰)$$
$$S_Y^2 = 2\langle \hat{n}^2 \rangle - 2\langle \hat{n} \rangle - \langle \hat{a}^4 \rangle - \langle \hat{a}^{\dagger 4} \rangle + (\langle \hat{a}^2 \rangle - \langle \hat{a}^{\dagger 2} \rangle)^2 \langle 0$$

با بررسی شکل(۳) مشخص است که با افزایش مرتبه میدان اولیه تا مقدار M=10 شاهد بروز هر چه بهتر ویژگی غیرکلاسیکی چلاندگی مربع دامنه در کوادراتور X هستیم. برای مراتب بالاتر، از میزان چلاندگی کاسته می‌شود تا اینکه برای مقدار M=100 چلاندگی مربع دامنه در تمام زمان برهم‌کنش از بین می‌رود.



شکل۳ : تحول زمانی چلاندگی مربع دامنه؛ پارامترها همانند شکل(۱) است.

نتیجه گیری

در این مقاله ضمن بررسی برهم‌کنش یک اتم سه ترازی V-گونه در حالت تشدید کامل با میدان تک مد، که در شروع برهم‌کنش به‌صورت یک حالت همدوس مرتبه M در نظر گرفته شده بود، اثر افزایش مرتبه میدان در بروز ویژگی‌های غیرکلاسیکی مورد مطالعه قرار گرفت. مشخص شد که افزایش مرتبه میدان اعمالی سبب بروز آمار کوانتومی زیرپوواسونی به عنوان یک ویژگی غیرکلاسیکی می‌شود. به‌علاوه افزایش مرتبه حالت همدوس تا یک مقدار مشخص سبب بروز هرچه بهتر چلاندگی مرتبه اول و مربع دامنه در کوادراتورهای میدان می‌شود. به عنوان یک حالت خاص بهبودی در این ویژگی‌های غیرکلاسیکی در مقایسه با نتایج مرجع [۱] کاملا قابل ملاحظه است. با این حال افزایش مرتبه حالت همدوس فراتر از این مقدار مشخص همانند نتایج بدست آمده در مرجع [۴] سبب کاهش چلاندگی شده و حتی در چلاندگی مربع دامنه، این افزایش، سبب از بین رفتن کامل این ویژگی غیرکلاسیکی می‌شود.

مرجع‌ها

[۱] Zait, R. A. "Nonclassical statistical properties of a three-level atom interacting with a single-mode field in a Kerr medium with intensity dependent coupling." *Physics Letters A* **319**, No. 5-6 (2003) 461-474.

[۲] Faghihi, M. J., and M. K. Tavassoly. "Dynamics of entropy and nonclassical properties of the state of a Λ-type three-level atom interacting with a single-mode cavity field with intensity-dependent coupling in a Kerr medium." *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **45**, No. 3 (2012) 035502.

[۳] Othman, Anas. "The Mth Coherent State." *International Journal of Theoretical Physics* 58, No. 8 (2019) 2451-2463.

[۴] Othman, Anas Ahmed. "Mth Coherent State Induces Patterns in the Interaction of a Two-Level Atom in the Presence of Nonlinearities." *International Journal of Theoretical Physics* **60**, No. 4 (2021) 1574-1592.

[۵] Bell, Eric Temple. "*Partition polynomials*." Annals of Mathematics (1927): 38-46.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

اثرات فشار هیدروستاتیکی و دما بر تغییرات ضریب شکست سیم کوانتومی

قاسمی ، زهرا؛ کریمی، محمد جواد؛ حسینی ، مهدی ؛کوثری ، مهدی

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شیراز

چکیده

در این مقاله اثرات فشار هیدرواستاتیکی و دما بر ضریب شکست خطی، غیر خطی و کل یک سیم کوانتومی GaAs/AlGaAs بررسی شده است. در تقریب جرم مؤثر، ساختار الکترونیکی با استفاده از روش ماتریس انتقال بدست آمده است و خواص نوری با استفاده از رهیافت ماتریس چگالی محاسبه شده است. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش فشارهیدروستاتیکی (دما) قله‌های تشدید بسمت انرژی‌های کمتر (بیشتر) جابجا می‌شوند.

واژه‌های کلیدی: *فشار هیدرواستاتیکی، ضریب شکست، سیم کوانتومی*

Hydrostatic pressure and temperature effects on the refractive index changes of quantum wire

Ghasemi, Zahra; Karimi, Mohammad Javad; Hosseini, Mahdi; Kowsari, Mahdi
Department of Physics, Shiraz University of Technology, Shiraz

Abstract

In this paper, the effects of the hydrostatic pressure and temperature on the linear, the nonlinear and the total refractive index changes of AlGaAs/GaAs quantum wire are investigated. In the effective-mass approximation, the electronic structure is obtained using the transfer matrix method and the optical properties are calculated using the density matrix approach. The results show that the resonance peaks shift toward the lower (higher) photon energies with increasing hydrostatic pressure (temperature).

Keywords: *Hydrostatic pressure, Refractive index, Quantum wire*

PACS No. 81, 78, 42

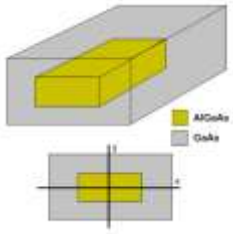
مقدمه

در سال‌های اخیر خواص اپتیکی سیستم‌های کوانتومی با ابعاد نانو از قبیل سیم‌های کوانتومی، چاه‌های کوانتومی و نقاط کوانتومی توجه محققین آزمایشگاهی و نظریه‌پردازان را به خود جلب کرده است. برخی از ترکیبات نیمه‌رساناهای III-V بدلیل داشتن گاف انرژی مستقیم در ابزار اپتوالکترونیکی کاربرد فراوان دارند و از جمله پرکاربردترین نیمه‌رساناها در ترکیبات III-V، GaAs است [۱]. سیستم‌هایی که در آنها حرکت حامل‌های بار در دو راستا محدود شود و حامل‌ها تنها در یک راستا آزادی حرکت داشته باشند، سیم‌های کوانتومی نامیده می‌شوند. سیم‌های کوانتومی با ساختار GaAs/AlGaAs کاربردهای فراوانی در وسایل اپتوالکترونیکی مانند کلیدهای نوری، آشکارسازها، لیزرهای نیمه‌رسانا و دیودهای نورگسیل دارند. در سال‌های اخیر تحقیقات زیادی در رابطه با اثرات میدان مغناطیسی، میدان الکتریکی، فشار هیدرواستاتیکی، دما و غیره بر روی خواص اپتیکی سیم‌های کوانتومی انجام شده است [۸-۲]. در اغلب این کارها محققان به بررسی سیم‌های کوانتومی استوانه‌ای پرداخته‌اند. ما در این مقاله می‌خواهیم به بررسی اثر فشار هیدروستاتیکی و دما بر روی تغییرات ضریب شکست سیم کوانتومی با مقطع مستطیلی بپردازیم.

مبانی نظری

یک سیم کوانتومی مستطیلی $GaAs/Al_{\gamma}Ga_{1-\gamma}As$ مطابق شکل ۱ درنظر می‌گیریم. در تقریب جرم مؤثر، هامیلتونی الکترون محبوس در این سیم کوانتومی مستطیلی با رابطه‌ی ۱ بیان می‌شود.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل ۱: طرحواره ای از یک سیم کوانتومی مستطیلی.

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)+V(x,y) \qquad (۱)$$

که وابستگی جرم مؤثر الکترون m^* به غلظت آلومینیوم (γ) بصورت زیر است.

$$m^*=(0.067+0.083\gamma)\times m_0 \qquad (۲)$$

که m_0 جرم الکترون آزاد است. پتانسیل تحدید بصورت زیر است

$$V_C(x,y)=\begin{cases}0 & |x|\le\frac{L}{2},|y|\le\frac{L}{2}\\ V_\circ & |x|\rangle\frac{L}{2},|y|\rangle\frac{L}{2}\end{cases} \qquad (۳)$$

که $V_\circ$ ارتفاع سد پتانسیل است و به صورت زیر داده می‌شود.

$$V_\circ=V_\circ(P,T)=0.6\Delta E_g^{\Gamma}(\gamma,P,T) \qquad (٤)$$

$\Delta E_g^{\Gamma}(\gamma,P,T)$ اختلاف گاف نواری سیم کوانتومی در نقطه Γ است و به صورت زیر داده می‌شود.

$$\Delta E_g^{\Gamma}(\gamma,P,T)=\Delta E_g^{\Gamma}(\gamma)+D(\gamma)P+G(\gamma)T \qquad (٥)$$

که در آن $\Delta E_g^{\Gamma}(\gamma)=(1.55\gamma+0.37\gamma^2)$ اختلاف گاف انرژی، $D(\gamma)=[-(1.3\times10^{-3})\gamma]eV/kbar$ و $G(\gamma)=[-(1.11\times10^{-4})\gamma]eV/K$ است.

وابستگی پهنا به فشار با رابطه زیر داده می شود [۹].

$$L(P)=L(0)(1-1.5082\times10^{-3}P) \qquad (٦)$$

که در آن $L(0)$ پهنای هر ضلع سیم کوانتومی در $P=0$ است. معادله شرودینگر برای چنین ساختاری به صورت زیر است:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)+V(x,y)\right)\phi_n(x,y)=E_n\phi_n(x,y) \qquad (٧)$$

که در آن $\phi_n(x,y)$ تابع موج، E_n ویژه مقدار انرژی و $V(x,y)$ پتانسیل تحدید است. حل معادله شرودینگر به صورت تحلیلی و با استفاده از روش ماتریس انتقال ویژه مقادیر انرژی و توابع موج متناظر با این نانو ساختار بدست می‌آید. سپس با استفاده از رهیافت ماتریس چگالی خواص نوری سیستم را بدست می‌آوریم. از آنجا که ساختار تقارن وارونی دارد خواص نوری غیرخطی مرتبه دوم در این ساختار مشاهده نمی‌شود. در روش ماتریس چگالی، تغییرات ضریب شکست مرتبه اول و سوم از روابط زیر بدست می‌آیند [۹].

$$\frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n_r}=\frac{\sigma_v q^2}{2n_r^2\varepsilon_\circ}\left[\frac{E_{21}-\hbar\omega}{(E_{21}-\hbar\omega)^2+(\hbar\Gamma_{21})^2}\right] \qquad (٨)$$

$$\frac{\Delta n^{(3)}(\omega)}{n_r}=-\frac{\sigma_v q^4\mu cI}{2n_r^3\varepsilon_\circ}\frac{|M_{21}|^2}{\left[(E_{21}-\hbar\omega)^2+(\hbar\Gamma_{21})^2\right]^2}\left[4(E_{21}-\hbar\omega)|M_{21}|^2-\frac{(M_{22}-M_{11})^2}{(E_{21})^2+(\hbar\Gamma_{21})^2}\right]\left\{(E_{21}-\hbar\omega)\left[E_{21}(E_{21}-\hbar\omega)-(\hbar\Gamma_{21})^2\right]-(\hbar\Gamma_{21})^2(2E_{21}-\hbar\omega)\right\} \qquad (٩)$$

و ضریب شکست کل برابر است با:

$$\frac{\Delta n(\omega)}{n_r}=\frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n_r}+\frac{\Delta n^{(3)}(\omega)}{n_r} \qquad (١٠)$$

در معادله بالا σ_v چگالی حامل‌های بار $M_{ij}=|\langle\varphi_i|er|\varphi_j\rangle|$، $(ij=1,2)$ عناصر ماتریس گشتاور دوقطبی، $r=\sqrt{x^2+y^2}$، $\varphi_i(\varphi_j)$ ویژه تابع و $E_{ij}=E_i-E_j$ اختلاف انرژی بین دو تراز است. n_r ضریب شکست، μ نفوذپذیری است.

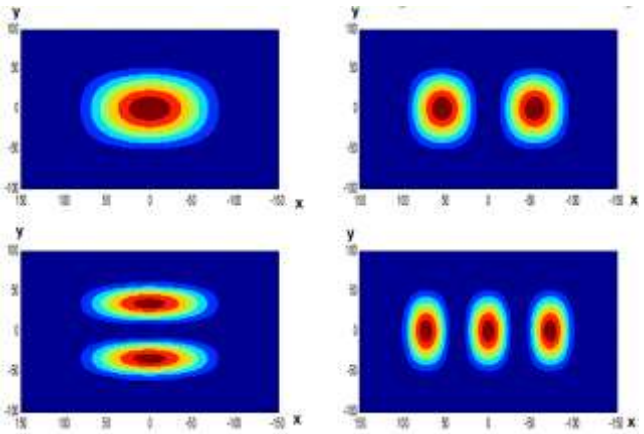
بحث

مقادیر پارامترهای فیزیکی مورد استفاده در محاسبات ما عبارتند از: $\mu=4\pi\times10^{-7}\,Hm^{-1}$، $\sigma_v=5.0\times10^{22}\,m^{-3}$،

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$n_r = 3.2$ ،$T_\circ = 0.14\,ps$ ،$\gamma = 0.3$ ،$m^*_{GaAs} = 0.067 m_e$
$I = 0.2 MW/cm^2$ ،$L_y = 10\,nm$ ،$L_x = 12\,nm$

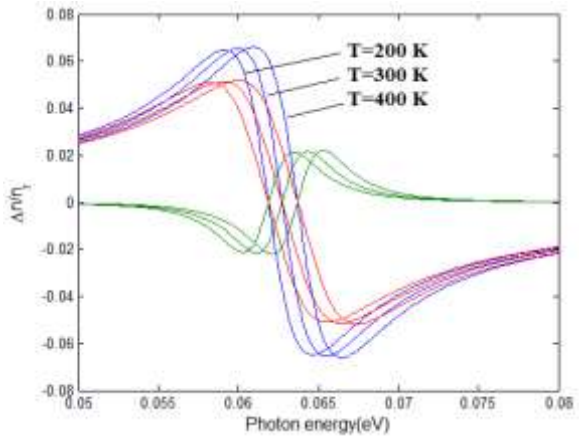
شکل ۲ نمایش کانتوری مربع تابع موج (چگالی احتمال) را برای پایین‌ترین حالتها نشان می‌دهد. این توابع مشابه اتم هیدروژن به ترتیب d, p_y, p_x, s نامیده می‌شوند. این توابع موج دارای تقارن مستطیلی هستند و نسبت به محورهای x و y متقارن هستند. همچنین برای مقادیر یکسان L_x و L_y حالت‌های P_x و P_y تبهگن می‌باشند و انرژی یکسانی دارند.



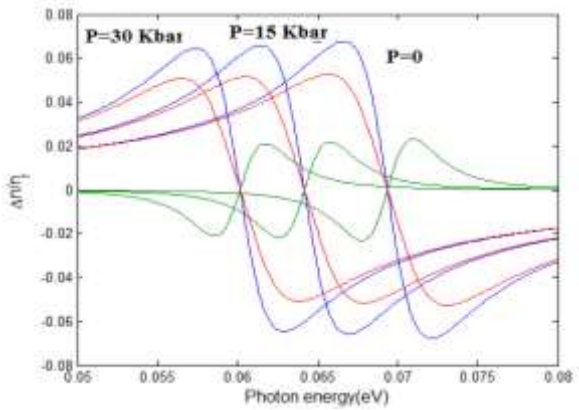
شکل ۲ : نمایش کانتوری مربع توابع موج(چگالی احتمال) پایین ترین حالتها.

در شکل ۳ تغییرات ضریب شکست خطی، غیرخطی و ضریب شکست کل برحسب انرژی فوتون فرودی برای مقادیر مختلف دما رسم شده است. این شکل نشان می‌دهد که با افزایش دما قله‌های تشدید ضریب شکست بسمت انرژی‌های انرژی‌های بزرگتر منتقل می‌شود و همچنین اندازه قله‌ها کمی افزایش می‌یابد. افزایش قله نمودارها ناشی از زیاد شدن گشتاور دوقطبی الکتریکی است و جابجایی بسمت انرژی‌های بیشتر ناشی از افزایش فاصله‌ی ترازهای انرژی می‌باشد. با افزایش دما جرم مؤثر الکترون کاهش می‌یابد و این منجر به افزایش ویژه مقادیر انرژی و عناصر ماتریس گشتاور دوقطبی می‌شود [۱۰].

شکل ٤ تغییرات ضریب شکست برحسب انرژی فوتون فرودی برای مقادیر مختلف فشار رسم شده است. این شکل نشان می‌دهد که با افزایش فشار بیشینه ضریب شکست به سمت انرژی‌های کمتر منتقل می‌شود و اندازه قله ضریب شکست کمی کاهش می‌یابد. دلیل نتیجه فوق این است که با افزایش فشار جرم مؤثر الکترون افزایش می‌یابد و پهنای سیم کوانتومی و ارتفاع سد پتانسیل کاهش می‌یابد [۱۰]. این تغییرات در مجموع منجر به کاهش ویژه مقادیر انرژی و افزایش عناصر گشتاور دو قطبی می‌شوند. بنابراین اندازه قله‌های ضریب شکست کاهش می‌یابد و به سمت انرژی‌های فوتونی کمتر جابجا می‌شوند.



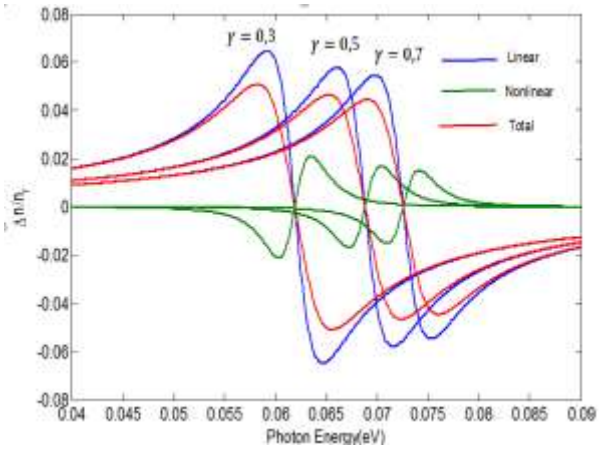
.شکل ۳ : تغییرات ضریب شکست خطی (آبی)، غیرخطی (سبز) و کل (قرمز) برحسب انرژی فوتون فرودی برای مقادیر مختلف دما



شکل ٤ : تغییرات ضریب شکست خطی (آبی)، غیرخطی (سبز) و کل (قرمز) برحسب انرژی فوتون فرودی برای مقادیر مختلف فشار.

شکل ۵ تغییرات ضریب شکست برحسب انرژی فوتون فرودی برای مقادیر مختلف غلظت آلومینیوم رسم شده است. این شکل نشان می‌دهد که با افزایش غلظت آلومینیوم قله ضریب شکست بسمت انرژی‌های بزرگتر منتقل می‌شود و اندازه‌ی قله کاهش می‌یابد. علت آن است که با افزایش غلظت آلومینیوم پتانسیل تحدید افزایش می‌یابد و ترازهای انرژی از هم دور می‌شوند و گشتاور دو قطبی الکتریکی کاهش می‌یابد.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



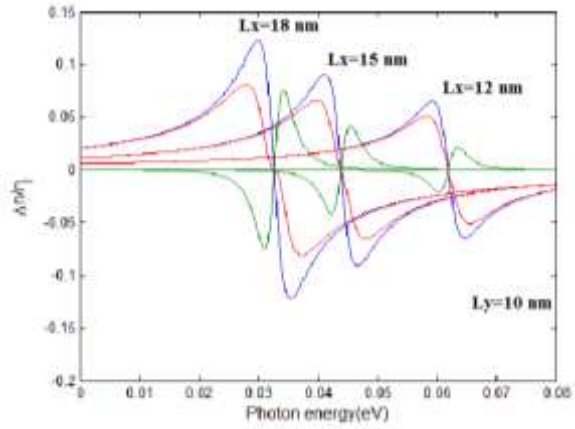
شکل ۵ : تغییرات ضریب شکست خطی، غیرخطی و کل برحسب انرژی فوتون فرودی برای مقادیر مختلف غلظت آلومینیوم.

شکل ٦ تغییرات ضریب شکست برحسب انرژی فوتون فرودی برای مقادیر مختلف پهنا رسم شده است. این شکل نشان می‌دهد که با افزایش پهنا ضریب شکست به سمت انرژی‌های کوچکتر منتقل می‌شود. اندازه‌ی قله افزایش و مکان قله به سمت انرژی‌های کوچکتر منتقل می‌شود. علت آن است که با افزایش پهنای سیم کوانتومی آزادی حرکت الکترون بیشتر می‌شود و پتانسیل تحدید کاهش می‌یابد.

بنابراین ترازهای انرژی بهم نزدیک می‌شوند و قله‌های ضریب شکست بسمت انرژی‌های کمتر جابجا می‌شوند. همچنین با افزایش پهنا گستردگی توابع موج افزایش می‌یابد و درنتیجه عناصر ماتریس گشتاور دو قطبی افزایش می‌یابند. بنابراین با افزایش پهنای سیم کوانتومی، اندازه قله‌های ضریب شکست افزایش می‌یابند.

نتیجه گیری

تاثیر فشار هیدروستاتیکی و دما بر روی ضریب شکست سیم کوانتومی مستطیلی بررسی شد. نتایج نشان می‌دهد افزایش فشار منجر به کاهش اختلاف انرژی بین ترازها می‌شود. درنتیجه قله‌های ضریب شکست به سمت انرژی‌های فوتونی کمتر جابجا می‌شود. همچنین با افزایش دما قله‌های ضریب شکست به سمت انرژی‌های فوتونی بیشتر جابجا می‌شود. با افزایش پهنای سیم کوانتومی اندازه قله‌های ضریب شکست بطور محسوسی افزایش می‌یابد ولی با افزایش غلظت آلومینیوم در لایه سد اندازه قله‌ها کاهش می‌یابد.



شکل٦: تغییرات ضریب شکست خطی (آبی)، غیرخطی (سبز) و کل (قرمز) برحسب انرژی فوتون فرودی برای مقادیر مختلف پهنا.

مراجع

[1] B. G. Yacobi; *"Semiconductor Materials An Introduction to Basic Principles"*; 1th edition, Springer Publishers, (2003), 164
[2] M. Kumar, S. Lahon, P.K. Jha, M. Mohan, Energy dispersion and electrong-factor of quantum wire in external electric and magnetic fields with Rashba spin-orbit interaction, *Superlattices and Microstructures*, **57** (2013)11-18.
[3] S. Lahon, M. Kumar, P.K. Jha, M. Mohan, Spin-orbit interaction effect on the linear and nonlinear properties of quantum wire in the presence of electric and magnetic fields, *Journal of Luminesence*. **144** (2013) 149-153
[4] S. Aktas, F.K. Boz, A. Bilekkay, S.E. Okan, The electronic properties of a coaxial square GaAs/AlxGa1xAs quantum well wire in an electric field, *Physica E* **41** (2009) 1572–1576.
[5] H. Ganjipour, Gh. Safarpour, The effects of pressure and hydrogenic donor impurity on the linear and nonlinear optical properties of GaAs/GaAlAs nanowire superlattice, *Physica E* **74** (2015) 496-504.
[6] E. Kasapoglu, F. Ungan, H. Sari, I. Sokmen, The hydrostatic pressure and temperature effects on donor impurities in cylindrical quantum wire under the magnetic field, *Physica E* **42** (2010) 1623–1626.
[7] U. Yesilgul, S. Şakirolu, E. Kasapolu, H. Sari, I. Sökmen, The effects of temperature and hydrostatic pressure on the photoionization cross-section and binding energy of impurities in quantum-well wires, *Superlattices and Microstructures*, **48** (2010) 106–113
[8] A. John Peter and K. Navaneethakrishnan; "Simultaneous effects of pressure and temperature on donors in a GaAlAs/GaAs quantum well"; *Superlattices Microstruct* **43**, No. 1 (2008) 63–71.
[9] M. Nazari, M.J. Karimi, A. Keshavarz, Linear and nonlinear optical absorption coefficients and refractive index changes in modulation-doped quantum wells: Effects of the magnetic field and hydrostatic pressure, *Physica B* **428** (2013) 30–35.
[10] M.J. Karimi and A. Keshavarz; "Second harmonic generation in asymmetric double semi-parabolic quantum wells: Effects of electric and magnetic fields, hydrostatic pressure and temperature"; *Physica E* **44**, No. 9 (2012) 1900–1904.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تغییر ساختار اتمی نیکل حین فعالیت کاتالیستی OER

محمدی ، محمدرضا[1] ؛ دائو، هولگر [2]
[1] گروه فیزیک، دانشگاه سیستان و بلوچستان
[2] گروه فیزیک، دانشگاه فرای برلین

چکیده

فعالیت کاتالیستی اکسید نیکل به مدت یک هفته در سلول شیشه‌ای حاوی محلول فاقد نیکل بورات بافر(pH 9.2) نشان می دهد که بار الکتریکی مربوط به پیک احیا در روز اول فعالیت کاتالیستی به طور زیاد کاهش می یابد و سپس به مقدار پایدار می رسد. اما فعالیت کاتالیستی اکسید نیکل رفتار متفاوتی را نشان می‌دهد به طوری که ابتدا کاهش یافته و به مقدار مینیمم می‌رسد سپس به طور پیوسته افزایش می یابد. افزایش پیوسته فعالیت کاتالیست، مربوط به آلودگی آهن آزاد شده از سلول شیشه‌ای می باشد. نتایج TXRF نشان می دهد که نسبت آهن به نیکل در حین فعالیت افزایش می یابد.

اسپکتروسکوپی جذبی اشعه ایکس(XAS) نشان می‌دهد که فاصله اتم های نیکل در ساختار اتمی کاتالیست نیکل وادار شده به فعالیت در پتانسیل های غیر کاتالیستی، حدود ۳ آنگستروم است اما پس از ۴۸ ساعت این فاصله کاهش می‌یابد. از طرفی، کاتالیست فعال در $1.4\ V_{NHE}$ ساختاری شبیه γ-NiOOH دارد و در طول فعالیت کاتالیستی این ساختار تغییر نمی‌کند.

واژه های کلیدی: کاتالیست نیکل، واکنش تکاملی اکسیژن، الکترولیز آب، اسپکتروسکوپی جذبی اشعه اشعه ایکس، ساختار اتمی

Atomic structural changes during catalytic activity of oxygen evolution reaction (OER)

Mohammadi, Mohammad Reza[1]; Dau, Holger[2]
[1] *Department of Physics, University of Sistan and Baluchestan, Zahedan,*
[2] *Department of Physics, Freie Universität Berlin, Germany*

Abstract

One-week operation of NiCat in Ni-free borate buffer pH 9.2 at non-catalytic and catalytic potentials in glass containers reveals that the charge associated with the nickel redox peak drastically decreases within the first day of operation and then reaches a steady-state condition. However, the catalytic current has a different behaviour; first it drops to reach a minimum and then it starts to continuously increase. The steady increase of the current is related to Fe contaminations of the glassware, confirmed by operation in a plastic container or Fe-containing buffer. TXRF analysis also confirms that the Fe:Ni ratio increases after the operation.

X-ray absorption spectroscopy shows that the atomic structure of the NiCat operated at non-catalytic potentials (0.8 and 0.9 V vs. NHE for 11 hours) has Ni-Ni_{long} coordinated at ~3.0 Å. However, after 48 hours of operation at these potentials, the structure is mixture of Ni-Ni_{long} as well as Ni-Ni_{short} structure at 2.8 Å. On the other hand, operation at catalytic potential (1.4 V vs. NHE) induces a structure similar to γ-NiOOH (Ni-Ni_{short} structure at 2.8 Å), which is majorly stable over electrolysis time.

***Keywords**: Nickel catalyst, Oxygen evolution reaction, Water splitting, X-ray absorption spectroscopy, Atomic structures*

PACS No. 81

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مقدمه

در میان چالشهای علمی و تکنیکی، نیاز به مواد پیشرفته و در عین حال سازگار با محیط زیست، یک نیاز اساسی برای الکترولیز آب در مقیاس بزرگ و صنعتی جهت تولید گاز هیدروژن ارزان، فراوان و تجدید پذیر می باشد [1-5].

تقلید از طبیعت یکی از راه های مفید جهت برآورده شدن این هدف است که از نشر دی اکسید کربن به محیط جلوگیری می کند [6].

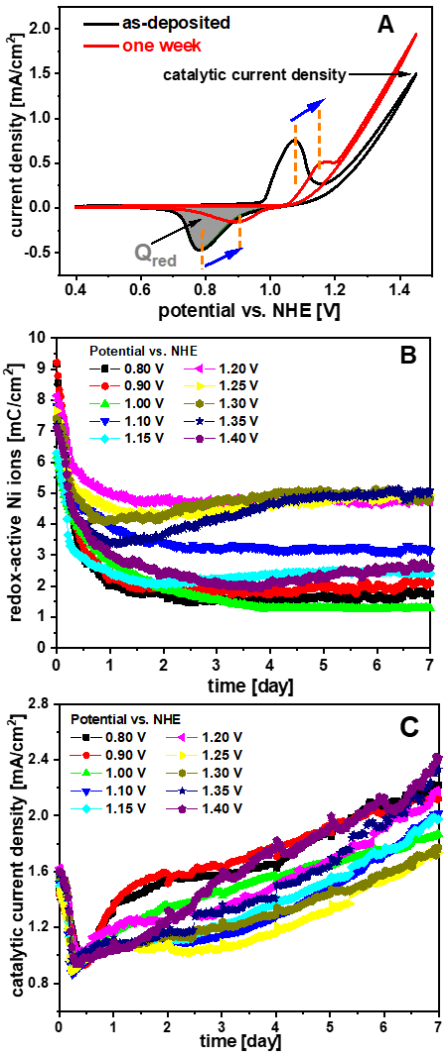
کاندیداهای اولیه جهت واکنش تکاملی اکسیژن (OER)، اکسید فلزات واسط ردیف اول جدول مندلیف خصوصاً منگنز آهن و نیکل است [4و7-8].

بر این اساس ما فعالیت کاتالیستی اکسید نیکل را برای مدت طولانی (یک هفته) و همچنین اثر خود ترمیمی و پایداری آن را در محلول بافر بورات (Bi, pH 9.2) در پتانسیل های مختلف را مورد مطالعه قرار داده و همچنین تاثیر مشارکت ناخالصی آهن بر فعالیت کاتالیستی آن نیز بررسی گردید. با استفاده از اسپکتروسکوپی اشعه ایکس (XAS) تغییرات ساختار اتمی نیز مورد مطالعه قرار گرفت.

بحث و نتایج

پایداری کاتالیست نیکل

فعالیت کاتالیستی لایه های اکسید نیکل با اعمال پتانسیل های مختلف (V_{NHE} 1.4 ,..., 0.9 , 0.8) به مدت یک هفته مورد مطالعه قرار گرفته است. در حین فعالیت کاتالیستی، هر نیم ساعت سیکل ولتامتری گرفته شد و از داده های مربوط به این سیکل فعالیت کاتالیستی و همچنین یونهای فعال نیکل به منظور مطالعه پایداری و اثر خودترمیم محاسبه گردید (شکل ۱). شکل ۱ نشان می دهد که پس از ۱۱ ساعت فعالیت در پتانسیل 0.8 و 0.9 ولت و ۱۷ ساعت در پتانسیل 1.4 ولت جریان کاتالیستی به مینیمم می‌رسد. در این مدت تعداد یون های فعال نیکل کاهش می یابد و پس از آن تقریباً ثابت می ماند در حالی که فعالیت کاتالیستی به طور پیوسته افزایش می یابد.



شکل ۱- سیکل ولتامتری با نرخ اسکن ۲۰ میلی ولت بر ثانیه مربوط به لایه نیکل انباشته شده و همچنین فیلم های وادار شده به فعالیت کاتالیستی در بافر بورات (A). مقدار بار منفی مربوط به سیکل احیا نیکل (B). جریان کاتالیستی استخراج شده از CV در 1.45 ولت (C).

تعیین تعداد دقیق اتم های نیکل

برای تعیین مقدار دقیق اتم های نیکل موجود در فیلم و مقایسه آن با مقدار بار محاسبه شده از سیکل ولتامتری، آنالیز فلورسانس برگشتی اشعه ایکس (TXRF) انجام گرفت. نتایج نشان می‌دهد که تعداد اتمهای نیکل فیلم های وادار شده به فعالیت کاتالیستی از فیلم تهیه شده اولیه

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

کمتر است که نشان دهنده آن است که مقداری از اتم های نیکل از لایه به داخل محلول مهاجرت کرده اند. همچنین نتایج نشان داد که مقدار بار منفی محاسبه شده از سیکل ولتامتری همخوانی خوبی با مقدار دقیق تعیین شده به وسیله آنالیز TXRF دارد.
تقریباً ۸۰ درصد فیلم های وادار شده در پتانسیل غیر کاتالیستی (0.8 و 0.9 ولت) و حدود ۵۰ درصد فیلمی که در پتانسیل کاتالیستی 1.4 ولت فعالیت کاتالیستی داشته اند بعد از یک هفته در محلول حل شده لذا مراکز فعال نیکل خیلی کاهش یافته است اما جالب آن است که جریان کاتالیستی افزایش یافته است که این فقط می‌تواند ناشی از ناخالصی آهن موجود در لایه باشد که قبلاً نیز گزارش شده است [9].
نتایج TXRF نشان می‌دهد که مقدار آهن موجود در لایه بعد از یک هفته افزایش یافته است.

افزایش فعالیت نیکل به وسیله ناخالصی موجود در سلول شیشه‌ای

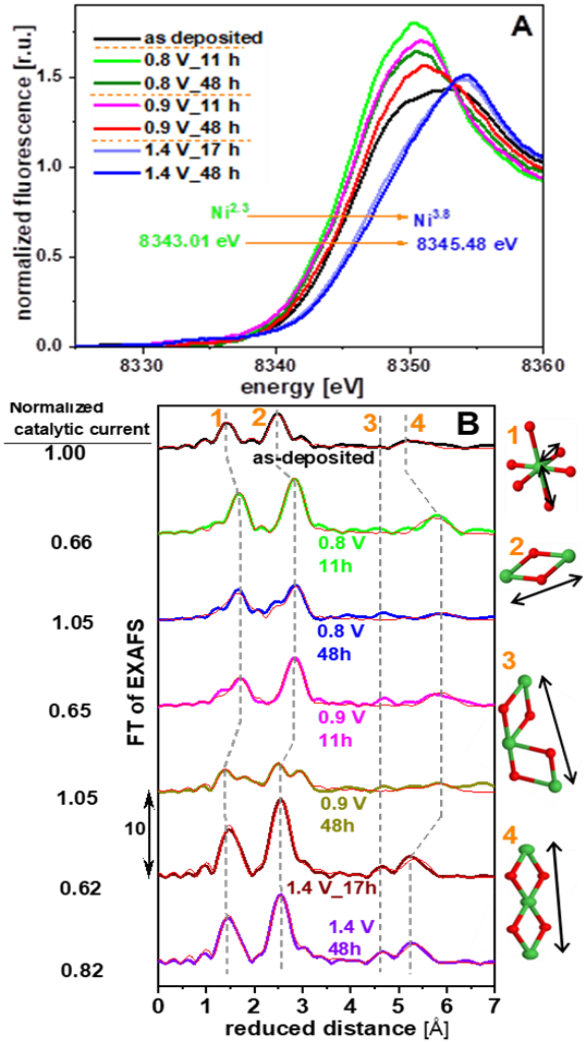
حال سوال این است که آهن موجود در فیلم از کجا آمده است؟
برای مطالعه بیشتر سلول شیشه ای را با سلول پلاستیکی عوض کردیم و به مدت یک هفته در سلول پلاستیکی وادار به فعالیت کردیم. جریان کاتالیستی فیلم های فعال در 0.9 و 1.4 ولت مربوط به دو سلول پلاستیکی و شیشه‌ای نشان داد که فعالیت کاتالیستی فیلم‌هایی که در سلول شیشه‌ای فعالیت کاتالیستی داشتند ۵۰ درصد بیشتر از سلول پلاستیکی است. لذا زمانی که سلول فاقد آهن استفاده شود فازهای فعال به طور محسوس کاهش می یابند.

نتایج اسپکتروسکوپی جذبی اشعه ایکس (XAS)

جهت تعیین ساختار اتمی از آنالیز اسپکتروسکوپی جذبی اشعه ایکس (XAS) بهره گرفتیم. اسپکتروسکوپی جذبی اشعه ایکس (XANES, EXAFS) مربوط به لبه جذب نیکل (Kα) در شتاب‌دهنده برلین (BESSY) در خط اشعه KMC-3 در دمای ۲۰ درجه کلوین انجام گرفت.
برای اسکن انرژی برانگیختگی اشعه ایکس از یک تک کروماتورو دوبلور سیلیکونی استفاده شده است. تمام طیف جذبی اشعه ایکس در حالت فلورسانس با استفاده از آشکارساز ۱۳ چشمی در ناحیه مربوط به نشر فلورسانس نیکل جمع‌آوری شده است.
برای هر نمونه چهار بار اندازه گیری انجام گرفته و برآیند آنها مورد تحلیل قرار گرفت. به کمک تبدیل فوریه طیف فلورسانس، فواصل بین اتمی تعیین گردید. به کمک نرم‌افزار و برازش داده ها، فواصل دقیق بین اتمی و همچنین تعداد اتم ها تعیین گردید.
همانطور که شکل ۱ نشان می‌دهد فعالیت کاتالیستی پس از ۱۱ ساعت برای فیلم فعال در $0.9\ V_{NHE}$ ولت و پس از ۱۷ ساعت برای $1.4\ V_{NHE}$ ولت به مقدار مینیمم خود می‌رسد و سپس به طور پیوسته افزایش می یابد. لذا جهت مطالعه ساختار اتمی، اسپکتروسکوپی جذبی اشعه ایکس از نمونه ها تهیه گردید.
XANES نشان می دهد که لبه جذب فیلم‌هایی که به مدت ۱۱ ساعت در پتانسیل غیر کاتالیستی فعال بوده اند به مقدار خیلی زیاد به سمت انرژی‌های کمتر شیفت پیدا کرده که متناظر با عدد اکسایش 2.3+ برای اتم نیکل است در حالی که پس از ۴۸ ساعت به 2.5+ می‌رسد (شکل ۲).
فیلم هایی که به مدت ۱۷ ساعت در پتانسیل کاتالیستی 1.4 ولت فعال بوده اند عدد اکسایش نیکل 3.8+ بوده که پس از ۴۸ ساعت نیز تغییر محسوسی نداشته است.
تبدیل فوریه طیف EXAFS نشان می دهد که پیک اصلی در فاصله کاهش یافته 1.5 آنگستروم مربوط به پیوند Ni-O و همچنین پیک دوم در فاصله کاهش یافته 2.5 آنگستروم متناظر با پیوند Ni-Ni است.
فیلم هایی که به مدت ۱۱ ساعت در پتانسیل غیر کاتالیستی فعال بوده اند، ساختار منظم تری پیدا کرده اند در حالی که فعالیت بیشتر فیلم به مدت ۴۸ ساعت باعث افزایش بی نظمی در نمونه گردیده است.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

فیلم‌هایی که در پتانسیل کاتالیستی 1.4 ولت فعال بوده‌اند دارای ساختار γ-NiOOH می باشند که در طی فرایند کاتالیزوری این ساختار ثابت می ماند.



شکل ۲- طیف لبه جذب اکسید نیکل انباشته شده و همچنین وادار شده به فعالیت کاتالیستی به مدت معین (A).
تبدیل فوریه EXAFS کاتالیست نیکل (B).
خطوط پررنگ مربوط به داده های آزمایش و خط باریک قرمز طیف شبیه سازی شده را نشان میدهد. توجه کنید که محور X فاصله کاهش یافته است که به اندازه حدود0.4 کمتر از مقدار واقعی است. پیکهای مربوط به فواصل Ni-O و Ni-Ni در شکل با خطی مشخص شده است.
رنگ موتیف های نشان داده شده به صورت زیر است: نیکل به رنگ سبز و اکسیژن به رنگ قرمز.

نتیجه گیری

فعالیت کاتالیستی اکسید نیکل به مدت یک هفته مورد بررسی قرار گرفت. داده ها نشان می دهد که در روز اول فعالیت، جریان کاتالیستی و همچنین بار منفی که متناظر با تعداد مراکز فعال کاتالیستی می باشد کاهش می یابد تا به مقدار مینیمم می‌رسد سپس جریان کاتالیستی به طور تدریجی و پیوسته افزایش می یابد در حالی که تعداد اتم های نیکل تقریباً ثابت است. این نشان می‌دهد که عامل دیگری می بایست به جریان کاتالیستی کمک کند. داده‌های TXRF نشان می دهد که تعداد اتمهای ناخالصی آهن که از سلول شیشه‌ای به فیلم وارد شده‌اند فعالیت کاتالیست را به طور قابل ملاحظه‌ای تغییر داده‌اند.
نتایج EXAFS نیز نشان می دهد که دو ساختار برای نمونه ها می توان تصور کرد:
Ni-Ni_{long} در حدود ۳ آنگستروم برای پتانسیل غیر کاتالیستی (0.8 و 0.9 ولت).
Ni-Nishort در حدود 2.8 آنگستروم برای پتانسیل کاتالیستی 1.4 ولت.

مرجع ها

1. Dau, H.; Limberg, C.; Reier, T.; Risch, M.; Roggan, S.; Strasser, P. The mechanism of water oxidation: from electrolysis via homogeneous to biological catalysis. *ChemCatChem* 2010, ***2***, 724-761.
2. Lewis, N.S.; Nocera, D.G. Powering the planet: Chemical challenges in solar energy utilization. *Proceedings of the National Academy of Sciences* 2006, ***103***, 15729-15735.
3. Nocera, D.G. Personalized energy: The home as a solar power station and solar gas station. *ChemSusChem: Chemistry & Sustainability Energy & Materials* 2009, ***2***, 387-390.
4. Risch, M.; Ringleb, F.; Kohlhoff, M.; Bogdanoff, P.; Chernev, P.; Zaharieva, I.; Dau, H. Water oxidation by amorphous cobalt-based oxides: in situ tracking of redox transitions and mode of catalysis. *Energy & Environmental Science* 2015, ***8***, 661-674.
5. Luo, J.; Im, J.-H.; Mayer, M.T.; Schreier, M.; Nazeeruddin, M.K.; Park, N.-G.; Tilley, S.D.; Fan, H.J.; Grätzel, M. Water photolysis at 12.3% efficiency via perovskite photovoltaics and Earth-abundant catalysts. *Science* 2014, ***345***, 1593-1596.
6. Man, I.C.; Su, H.Y.; Calle-Vallejo, F.; Hansen, H.A.; Martinez, J.I.; Inoglu, N.G.; Kitchin, J.; Jaramillo, T.F.; Nørskov, J.K.; Rossmeisl, J. Universality in oxygen evolution electrocatalysis on oxide surfaces. *ChemCatChem* 2011, ***3***, 1159-1165.
7. Kanan, M.W.; Nocera, D.G. In situ formation of an oxygen-evolving catalyst in neutral water containing phosphate and Co2+. *Science* 2008, ***321***, 1072-1075.
8. Kanan, M.W.; Surendranath, Y.; Nocera, D.G. Cobalt–phosphate oxygen-evolving compound. *Chemical Society Reviews* 2009, ***38***, 109-114.
9. Trotochaud, L.; Young, S.L.; Ranney, J.K.; Boettcher, S.W. Nickel–iron oxyhydroxide oxygen-evolution electrocatalysts: the role of intentional and incidental iron incorporation. *Journal of the American Chemical Society* 2014, ***136***, 6744-6753.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مطالعه نظری اثر حالت‌های کوپل‌شده در سطح مقطع جزئی فرآیند تهییج

امیری بیدوری، سعیده؛ فتحی، رضا

دانشکده فیزیک دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان، ایران

چکیده

در کارحاضر سطح مقطع جزئی فرآیند تهییج اتم‌های هیدروژن و هلیوم به حالت‌های برانگیخته‌ی $2s$، $2p$، 2^1S و 2^1P در برخورد با الکترون در محدوده‌ی انرژی‌های بالا محاسبه شده است. در این محاسبات از تقریب مرتبه‌ی دوم بورن استفاده گردید و علاوه بر کوپل‌شدگی حالت اولیه و نهایی، کوپل شدگی حالت‌های $1s$، $2s$ و $2p$ در نظر گرفته شد. با مقایسه نتایج مربوط به سطح مقطع جزئی با نتایج تجربی و نظری در دسترس اثر کوپل‌شدگی‌ها برای گذار از حالت پایه به حالت‌های برانگیخته مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان دادند که در فرمول‌بندی حاضر کوپل شدگی‌ها در گذار $1s \rightarrow 2s$ اتم هیدروژن قابل توجه است.

Theoretical Study of the Coupled States Effect on the Differential Cross Section of Excitation Process

Amiri Bidvari, Saeideh; Fathi, Reza

Faculty of Physics, Shahid Bahonar University of Kerman, Kerman, Iran.

Abstract

In the present work, the excitation differential cross section of hydrogen and helium atoms to the $2s$, $2p$, 2^1S and 2^1P excited states by electron impact at high energy range has been calculated. In this calculation, the second-order Born approximation is used and in addition to the initial and final states coupling the effect of the $1s$, $2s$ and $2p$ states coupling was considered. By comparing the results of the differential cross section with the available experimental and theoretical results the effect of these couplings on transition from the ground to the excited states has been investigated. In the present formalism the results shown that the couplings on the $1s \rightarrow 2s$ transition of atomic hydrogen are remarkable.

PACS No. 034

مقدمه

نقش مهم آزمایش‌های پراکندگی در توسعه‌ی فیزیک مدرن بر کسی پوشیده نیست و یکی از مهم‌ترین روش‌های آزمایشگاهی در فیزیک کوانتومی آزمایش‌های پراکندگی است. پراکندگی امواج الکترومغناطیسی و ذرات مادی توسط هدف‌های مختلف همواره به‌عنوان ابزاری برای کشف ناشناخته‌های طبیعت به‌کارگرفته شده است. داده‌ها و اطلاعات حاصل از پراکندگی ذرات برای انواع مختلف فرآیندها از جمله یونیزاسیون، تهییج، انتقال بار و ترکیب‌های مختلف آن‌ها در بسیاری شاخه‌های مختلف علم و صنعت نظیر کیهان‌شناسی، فیزیک ماده‌چگال، پلاسما، فیزیک هسته‌ای، فیزیک نجومی، پزشکی و بیوفیزیک به‌کار گرفته می‌شود[۱-٤].

هدف از مطالعه‌ی نظری فیزیک برخورد این است که بتوان تا حد امکان چگونگی رفتار سیستم در ناحیه‌ی برهم‌کنش را با استفاده از

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مدل‌های ارائه شده پیش‌بینی کرد. به عبارت دیگر هدف پیش‌بینی محصولات حاصل از آزمایش با تعیین دقیق شرایط کانال ورودی است. کمیتی که می‌تواند به‌خوبی یک فرآیند پراکندگی را توصیف کند و اطلاعات لازم را در اختیار بگذارد دامنه‌ی پراکندگی است که سطح مقطع جزئی و سطح مقطع کل از آن نتیجه می‌شود. بنابراین محاسبه‌ی دقیق دامنه پراکندگی از زمانی که اولین آزمایشات پراکندگی از جمله پراکندگی رادرفورد شکل گرفته در فیزیک اتمی اهمیت بسیاری دارد.

برای پراکندگی الکترون و یون‌های مختلف با اتم‌ها روش‌های کلاسیکی، نیمه کلاسیکی[۵] و کوانتومی بسیاری از جمله تقریب بورن [۶]، FWL[1] [۷] و CDW[2] [۸] عنوان شده است.

در این مقاله از تقریب مرتبه‌ی دوم بورن برای بررسی فرآیند تهییج استفاده شده است. در این صورت پتانسیل برهم‌کنش بین پرتابه و هدف اختلال نسبتا کوچکی است که اجازه می‌دهد تابع موج پرتابه به‌صورت تابع موج ذره‌ی‌آزاد در نظر گرفته شود. در کار حاضر ابتدا اتم هیدروژن که ساده‌ترین اتم می‌باشد به‌عنوان هدف در نظر گرفته شده و سطح مقطع جزئی برای گذار از حالت پایه به حالت‌های $2s$، $2p$ و $n=2$ در برخورد اتم هیدروژن با الکترون محاسبه شده و اثرات کوپل‌شدگی مورد بررسی قرار گرفته است. سپس با بررسی سطح مقطع جزئی برای اتم هلیوم در برخورد با الکترون تقریب حاضر به اتم‌های پیچیده‌تر تعمیم داده شده است.

تئوری

سطح مقطع‌های جزئی در فرآیندهای تهییج

$$\begin{aligned} &e+H(1s)\rightarrow e+H(2s)\\ &e+H(1s)\rightarrow e+H(2p)\\ &e+He(1^1S)\rightarrow e+He(2^1S)\\ &e+He(1^1S)\rightarrow e+He(2^1P) \end{aligned} \qquad (۱)$$

با استفاده از رابطه‌ی

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\frac{k_f}{k_i}\left|f\left(\vec{k}_i,\vec{k}_f\right)\right|^2 \qquad (۲)$$

محاسبه می‌گردد. $\vec{k}_i$ اندازه‌حرکت اولیه، $\vec{k}_f$ اندازه‌حرکت نهایی پرتابه می‌باشد. دامنه پراکندگی در تقریب مرتبه‌ی دوم بورن برای فرآیند تهییج از عبارت

$$f\left(\vec{k}_i,\vec{k}_f\right)=f_1\left(\vec{k}_i,\vec{k}_f\right)+f_2\left(\vec{k}_i,\vec{k}_f\right) \qquad (۳)$$

حاصل می‌گردد. در این عبارت سهم جملات مرتبه‌ی اول و دوم بسط اختلالی برای دامنه‌ی پراکندگی در فضای موقعیت به‌صورت

$$f_1\left(\vec{k}_i,\vec{k}_f\right)=-\frac{2\mu}{4\pi}\int e^{i\left(\vec{k}_i-\vec{k}_f\right)\cdot\vec{R}}V_{fi}(\vec{R})d\vec{R} \qquad (٤)$$

و

$$f_2\left(\vec{k}_i,\vec{k}_f\right)=\frac{(2\mu)^2}{4\pi}\int e^{i\left(\vec{k}_i\cdot\vec{R}-\vec{k}_f\cdot\vec{R}'\right)} \times\frac{e^{ik_n\left|\vec{R}-\vec{R}'\right|}}{4\pi\left|\vec{R}-\vec{R}'\right|}V_{fn}(\vec{R}')\,V_{ni}(\vec{R})d\vec{R}d\vec{R}' \qquad (۵)$$

بیان می‌شود[۹]. در رابطه‌ی (۵) $k_n=2\mu(E-E_n)$، به‌طوری‌که E انرژی کل حرکت نسبی، E_n انرژی حالت nام اتم هیدروژن و μ جرم کاهش یافته می‌باشد. عناصر پتانسیل $V_{nm}\left(\vec{R}\right)$ از رابطه‌ی

$$V_{nm}=\int\varphi_n^*\left(\vec{r}\right)V\left(\vec{r},\vec{R}\right)\varphi_m\left(\vec{r}\right)d\vec{r} \qquad (٦)$$

محاسبه‌می‌شود. این عبارت برای اتم هلیوم به صورت

$$V_{nm}\left(\vec{R}\right)=\iint\psi_n^*\left(\vec{r}_1,\vec{r}_2\right)V\left(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{R}\right)\psi_m\left(\vec{r}_1,\vec{r}_2\right)d\vec{r}_1d\vec{r}_2 \qquad (۷)$$

بازنویسی می‌گردد.

پتانسیل برهم‌کنش برای اتم‌های هیدروژن و هلیوم به صورت

$$V\left(\vec{r},\vec{R}\right)=Ze^2\left(\frac{1}{R}-\frac{1}{\left|\vec{R}-\vec{r}\right|}\right) \qquad (۸)$$

$$V\left(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{R}\right)=Ze^2\left(\frac{2}{R}-\frac{1}{\left|\vec{R}-\vec{r}_1\right|}-\frac{1}{\left|\vec{R}-\vec{r}_2\right|}\right) \qquad (۹)$$

در نظر گرفته شده است.

در محاسبات تهییج اتم هیدروژن ابتدا کوپل شدگی حالت‌های $1s$، $2s$ و $2p$ در نظر گرفته شده و سپس به منظور حذف کوپل‌شدگی‌ها و مقایسه‌ی نتایج با نتایج حالت‌های کوپل شده، در رابطه‌ی (۵) بردار موج میانی k_n با بردار موج اولیه‌ی k_i یکسان در نظر گرفته شده و از رابطه‌ی کامل بودن برای اتم هیدروژن به شکل

[1] Faddeev Watson Lavelace
[2] Continuum Distorted Wave

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$$\sum_n \varphi_n^*(\vec{r}')\varphi_n(\vec{r}) = \delta(\vec{r}-\vec{r}') \qquad (۱۰)$$

استفاده شده است. در مورد اتم هلیوم رابطه‌ی کامل بودن به‌صورت

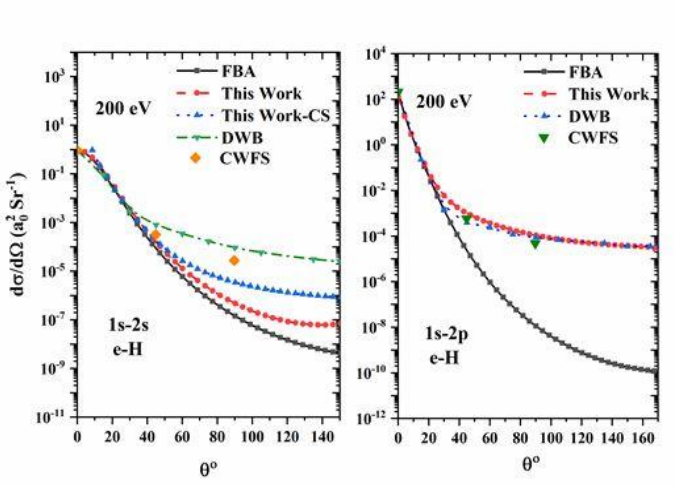
$$\sum_n \psi_n^*(\vec{r}_1',\vec{r}_2')\psi_n(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \frac{1}{2}\left[\delta(\vec{r}_1-\vec{r}_1')\delta(\vec{r}_2-\vec{r}_2')+\delta(\vec{r}_1-\vec{r}_2')\delta(\vec{r}_2-\vec{r}_1')\right] \qquad (۱۱)$$

فرض شده است که با توجه به در نظر گرفتن تابع موج متقارن دوالکترونی برای اتم هلیوم رابطه‌ی کامل بودن برای این اتم در رابطه‌ی (۱۱) متقارن سازی شده است.

بحث و نتیجه‌گیری

در این بخش نتایج حاصل برای سطح مقطع جزئی فرآیند تهییج اتم‌های هیدروژن و هلیوم با نتایج نظری و تجربی در دسترس مقایسه گردیده است. در شکل(۱) سطح مقطع جزئی گذار از حالت پایه به حالت‌های $2s$ و $2p$ اتم هیدروژن در برخورد با الکترون‌های با انرژی ۲۰۰ الکترون ولت با در نظر گرفتن حالت‌های کوپل‌شده $(ThisWork-CS)$ و بدون در نظر گرفتن آن‌ها $(This\ Work)$ در مقایسه با روش‌های تقریب مرتبه‌ی اول بورن، DWB [۱۰][3] و $CWFS$ [۱۱][4] آورده شده است.

همان‌طور که در این محدوده انرژی انتظار می‌رود تقریب مرتبه‌ی دوم در زوایای بزرگ پراکندگی نتایج بهتری نسبت به نتایج تقریب مرتبه‌ی اول داشته باشد، مشاهده می‌شود در گذار به حالت $2s$ وارد کردن حالت‌های کوپل شده بهبود قابل توجهی در نتایج سطح مقطع جزئی در مقایسه با نتایج محاسبات دقیق تر $CWFS$ دارد. از طرف دیگر به نظر می‌رسد که در مورد گذار به حالت $2p$ وارد کردن حالت‌های کوپل شده در محدوده‌ی انرژی مورد بحث اهمیت ندارد و نتایج بدون در نظر گرفتن کوپل شدگی‌ها هم‌خوانی قابل توجهی را با نتایج $CWFS$ نشان می‌دهد.



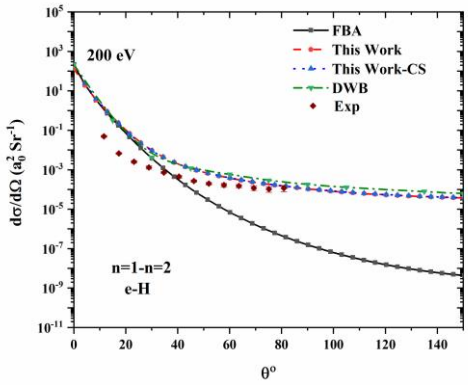
شکل(۱): مقایسه نتایج سطح مقطع جزئی برای گذار های $2s$ و $2p$ در برخورد اتم هیدروژن با الکترون.

در شکل (۲) نتایج سطح مقطع جزئی برای گذار از حالت پایه به حالت $n=2$ با نتایج تجربی [۱۲] و نظری DWB [۱۰] برای الکترون‌های فرودی با انرژی 200 الکترون ولت آورده شده است. نزدیکی نتایج تقریب مرتبه دوم با در نظر گرفتن حالت‌های کوپل‌شده برای گذار به حالت $2s$ و بدون در نظر گرفتن آن‌ها به یکدیگر و به نتایج تجربی بیان می‌کند که در گذار به حالت $n=2$ سهم سطح مقطع گذار به حالت $2p$ بیشتر بوده و وارد کردن حالت‌های کوپل‌شده الزامی ندارد.

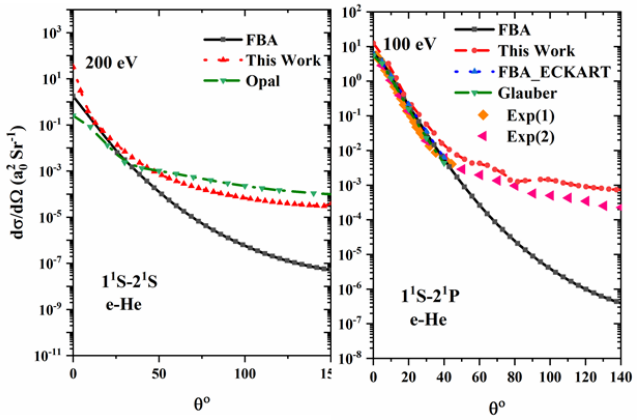
سطح مقطع جزئی گذار به حالت‌های 2^1S و 2^1P اتم هلیوم در برخورد با الکترون در شکل (۳) به ترتیب برای انرژی‌های 200 و 100 کیلو الکترون ولت آورده شده است. در گذار به حالت 2^1S مقایسه نتایج کار حاضر با نتایج $Opal$ [۱۳] بهبود قابل توجهی را نسبت به تقریب مرتبه‌ی اول نشان می‌دهد و هم‌خوانی نتایج با داده‌های نظری دیگر مشهود است. همچنین نتایج سطح مقطع جزئی برای گذار 2^1P اتم هلیوم هم‌خوانی بسیار خوبی را با نتایج نظری [۱۴و۱۵و۱۶] و تجربی [۱۷و۱۶] نشان می‌دهد.

[3] Distorted Wave Born
[4] Coulomb Wave final state

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل(۲): مقایسه نتایج سطح مقطع جزئی با و بدون در نظر گرفتن حالت‌های کوپل شده برای گذار $n=1\rightarrow n=2$ در برخورد اتم هیدروژن با الکترون.



شکل (۳): مقایسه نتایج سطح مقطع جزئی برای گذار به حالت‌های 2^1S و 2^1P در برخورد اتم هلیوم با الکترون.

همان‌طور که از نتایج ارائه شده مشخص است نظریه‌ی اختلالی مرتبه‌های بالاتر موجب بهبود نتایج سطح مقطع جزئی فرآیند تهییج در زوایای بزرگ پراکندگی خواهد شد. از طرف دیگر وارد کردن محاسبات سنگین مربوط به کوپل‌شدگی حالت‌های مختلف تنها در محاسبات سطح مقطع جزئی گذار به حالت شبه پایدار $2s$ اتم هیدروژن ضروری می‌باشد و برای گذار به سایر حالت‌های برانگیخته و گذارهای 2^1S و 2^1P اتم هلیوم، سهم عمده تنها مربوط به کوپل‌شدگی بین حالت اولیه و حالت نهایی است. بنابراین فرمول‌بندی که تنها کوپل‌شدگی حالت اولیه و نهایی را در برمی‌گیرد برای فرآیندهای بررسی شده منجر به نتایج صحیحی می‌گردد.

مرجع‌ها

[1] A. Barrau, K. Martineau, F. Moulin, Dark Matter and Gravitational Waves, *A Status Report on the Phenomenology of Black Holes in Loop Quantum Gravity: Evaporation, Tunneling to White Holes, Dark Matter and Gravitational Waves*, Universe 4 (2018) 102 (26pp).
[2] A. Simonin and et al, *Negative ion source development for a photoneutralization based neutral beam system for future fusion reactors*, New J, Phys 18 (2016) 125005 (13pp).
[3] K. D. Kuntz and *et all*, *The solar wind charge-exchange production factor for hydrogen*, The Astrophysical Journal, 808 (2015) 143 (19pp).
[4] W. Lip, J. Tanner, Y. JamilT and F. Gallagher, *Ionization and plasma formation in high n cold Rydberg samples*, Eur. Phys. J. D 40 (2006) 27-35.
[۵] ر. **فتحی**، س. **امیری بیدوری**، *محاسبهٔ تحلیلی دامنه‌های پراکندگی برای گذار از حالت پایه به حالت‌های ns و np اتم هیدروژن در برخورد با پروتون در کانال تهییج- فرمول‌بندی نیمه‌کلاسیکی*، **مجله پژوهش سیستم‌های بس ذره‌ای ۷ (۱۳۹۶) ۱۷۳-۲۰۰.**
[6] S. Obeid, O. Chuluunbaatar, B. B. Joulakian, *(e, 2e) simple ionization of H_3^+ by fast electron impact: use of triangular three-center continuum and bound state wave functions*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys 50 (2017) 145201(9pp).
[7] R. Fathi, F. Shojaei, M. A. Bolorizadeh, M. J. Brunger, *Three-body treatment of the Z-dependence for excitation cross sections in A^{q+} + H (1s) collisions — Excitation from the ground to the 2s and 3s states*, Eur, Phy. J. D (2015) 69:170 pp7.
[8] O. G. De Lucio, S. Otranto, R. E. Olson, R. D. DuBo, *Triply differential single ionization of argon: charge effects for positron and electron impact*, Phys. Rev. Lett. 104 (2010) 163201.
[9] D. P. Dewangan, *On higher order Born approximations in atomic scattering calculations*, J. Phys. 8: Atom. Molec. Phys. 13 (1980) L595-L598.
[10] R. V. Calhoun, D. H. Madison, *Excitation of the n=2 state of atomic hydrogen by electron impact in the distorted-wave approximation*, Phys. Rev A 14 (1976) 1380-1387.
[11] S. Geltman, M. B. Hidalgo, *A note on the off-shell Coulomb T matrix. III. Inelastic eH differential cross sections*, J. Phys, B : Atom. Molec. Phys 4 (1971) 1299-1307.
[12] J. F. Williams, B. A. Willis, *Electron scattering from atomic hydrogen. I. Differential cross sections for excitation of the n= 2 states*, J. Phys. B : atom. Molec. Phys. 8 (1975) 1691-1669.
[13] A. K. Biswas, *Electron impact excitation of the 2^1S state of helium at intermediate and high energies*, J. Phys. B: At. Mol. Phys. 17 (1984) 1889-1897.
[14] H. S. W. Massey , E. H. S. Burhop, Electronic and Ionic Impact Phenomena vol 1 (Oxford: Clarendon press) (1969) 477-501.
[15] J. Z. Terebey, *Electron 21P helium scattering cross sections using Glauber theory*, J. Phys B: At. Mol. Phys. 7 (1974) 460-467.
[16] R. Ward, et all, *Differential cross sections for electron impact excitation of the n= 2 states of helium at intermediate energies (80 eV, 100 eV and 120 eV) measured across the complete angular scattering range (0°-180°)*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.44 (2011) 045209 (10pp).
[17] D. C. Cartwight, G. Csanak, *Electron-impact excitation of the n^1P levels of helium: Theory and experiment*, Phys. Rev A 45 (1992) 1602-1624.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

پیش‌بینی ضریب شکست ترکیبات معدنی با استفاده از روش‌های یادگیری ماشین

عین‌آبادی ، الهام [1] ؛ مشکوری ، مهدی [1]

[1] دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی ،خیابان کاویان شرقی ، تهران

چکیده

ضریب شکست یکی از ویژگی‌های مهم ماده است که برای گزینش مواد به خصوص در زمانی که خواص نوری مهم هستند، ضروری است. محاسبه دقیق ضریب شکست زمان‌بر و دارای چالش‌های خاص خود است، در حالی که با استفاده از روش‌های نیمه‌تجربی و محاسباتی می‌توان بسیاری از این موانع را پشت سر گذاشت. در این پژوهش، ما از داده‌های تجربی ضریب شکست مربوط به ۲۳۵ ترکیب معدنی برای ساخت یک مدل یادگیری ماشین استفاده کردیم که قادر به پیش‌بینی ضریب شکست مواد با دقت بالا است. برای رسیدن به نتیجه بهتر، از دو روش رگرسیون OLSR و SVR بهره گرفتیم و همچنین علاوه بر گاف انرژی، از چند ویژگی اتمی مربوط به عناصر تشکیل دهنده ترکیبات به عنوان پیش‌بینی‌کننده استفاده کردیم تا روش رگرسیون بهینه و مجموعه پیش‌بینی‌کننده‌های مناسب را بیابیم.

واژه های کلیدی: *ضریب شکست، یادگیری ماشین، رگرسیون OLSR، رگرسیون SVR.*

Predicting the refractive index of inorganic compounds using machine learning methods

Einabadi, Elham[1]; Mashkoori, Mahdi[1]

[1] *Department of Physics, K.N. Toosi University of Technology, Tehran*

Abstract

The refractive index is a crucial material property and is necessary for making material selection decisions when optical properties are important. Precise calculation of the refractive index is time-consuming and has its challenges. Many of these barriers can be overcome by implementing semi-empirical and computational methods. In this work, we utilized experimentally measured refractive index data of 235 inorganic compounds to construct a machine learning model capable of making high-accuracy predictions of refractive indexes. To predict the refractive index of inorganic materials, we examined the two regression methods, OLSR and SVR. Also, we used some of the atomic properties in addition to the band gap as a predictor to find the optimal regression method and the appropriate set of predictors.

Keywords: *refractive index, machine learning, OLSR regression, SVR regression.*

مقدمه

ضریب شکست یکی از بنیادی‌ترین ویژگی‌های اپتیکی مواد است که سرعت انتشار امواج الکترومغناطیسی را در مواد تعیین می‌کند. دانستن ضریب شکست ترکیب‌های معدنی برای درک رفتار مواد در محدوده طول موج نوری ضروری است و به طور گسترده برای طراحی دستگاه های نوری در صنعت استفاده می‌شود [۲-۱]. از جمله کاربردهای تجربیِ ضریب شکست می‌توان به استفادهیِ آن در دستگاه‌های اپتیکی به صورت سوییچ‌ها، فیلترها و مدولاتورها اشاره کرد. علاوه بر این، ضریب شکست یکی از مهم‌ترین ویژگی‌ها برای ارزیابی یک ماده معین با کاربردهای نوری غیرخطی است. بنابراین، مطالعات زیادی برای یافتن یک فرمول تجربی انجام شده است که ضریب شکست را بر حسب سایر خواص فیزیکی ماده بیان کند. به طور کلی دقت و تعمیم پذیری این روابط در طول زمان به دلیل پیشرفت‌های به‌دست آمده در تکنیک‌ها و ابزارهای اندازه گیری، بهبود یافته است. با این حال، این تخمین‌ها همچنان کاستی‌های خاص خود را دارند. اکثر تخمین‌ها فقط بر روی نوع خاصی از مواد پیش بینی‌های مطلوبی دارند (مثلا نیمه رساناها یا آلیاژهای Pb/Sn Te). اساسا ضریب شکست به مکانیسم‌های

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تشدید میکروسکوپی متعددی هم‌چون ممان دوقطبی وابسته به زمان الکترون‌ها، اتم‌ها و سایر نوسان‌گرها وابسته است[۱]. در حالت کلاسیک، ضریب شکست را می‌توان بر حسب فرکانس‌های تشدید، ω_0، مربوط به نوسانگرهای مختلف بیان کرد:

$$n^2 = \epsilon_r(\omega) = \left(1 + \frac{Ne^2}{\epsilon_0 m_0}\sum_j \frac{f_j}{(\omega_{0j}^2 - \omega^2 - i\gamma_j\omega)}\right) \quad (۱)$$

که f_j قدرت نوسانگر است که احتمال گذار کوانتومی را نشان می‌دهد، m_0 جرم الکترون است و γ نرخ میرایی است[۳]. از آن‌جایی که گاف انرژی یکی از ویژگی‌های گذار در نوار انرژی است، بیان ضرایب شکست بر حسب گاف انرژی به طور طبیعی مشارکت سایر نوسانگرها را از دست می‌دهد. لذا، به اعتبار این که منابع محاسباتی در حال رشد هستند و الگوریتم‌های بهتر به طور قابل توجهی این جستجو را تسریع کرده‌اند، پیچیدگی مسئله مستلزم استفاده از رویکردهای جدید است.

در دهه‌های اخیر، حجم داده‌های علمی جمع آوری شده، ظهور رویکردهای داده‌ای جدید را در جستجوی مواد کاربردی جدید تسهیل کرده است. در این زمینه، یادگیری ماشین روشی جذاب برای غربالگری مجوعه‌هایی از مواد ارائه می‌دهد. داشتن یک مدل یادگیری ماشین دقیق در دسترس می‌تواند شناسایی مواد کاربردی جدید را به شدت تسریع کند، زیرا پیش‌بینی ویژگی مورد علاقه برای یک ساختار معین، مدل‌سازی از نظر محاسباتی گران مبتنی بر روش‌های اولیه را دور می‌زند. با توجه به اهمیتی که ضریب شکست برای کاربردهای مختلف دارد و پیشرفت سریع در حوزه علوم داده و یادگیری ماشین، بررسی روش‌های یادگیری ماشین برای پیش‌بینی ضریب شکست مواد با استفاده از ویژگی‌های در دسترس می‌تواند قدمی رو به جلو در این زمینه باشد. با این که پیش‌تر در مواردی تلاش‌هایی در این زمینه صورت گرفته اما هنوز با انتخاب تکنیک‌های رگرسیون و پیش‌بینی‌کننده‌های بهتر و در دسترس‌تر مانند ویژگی‌های اتمی، فضای زیادی برای بهبود نتایج وجود دارد. در این مقاله، مدل‌های پیش‌بینی ضریب شکست را با استفاده از انواع مختلف پیش‌بینی‌کننده‌ها و تکنیک‌های رگرسیون بررسی می‌کنیم.

روش‌های رگرسیون

رابطه بین یک ویژگی هدف و پیش‌بینی‌کننده‌ها را می‌توان با روش‌های رگرسیون به دست آورد. قابل اعتماد بودن تخمین در این روش‌ها به کیفیت مجموعه داده آموزشی، انتخاب پیش‌بینی‌کننده‌ها و روش رگرسیون بستگی دارد. برای یک مجموعه داده آموزشی معین، انتخاب پیش‌بینی‌کننده‌های مناسب و روش‌های رگرسیون بهینه ضروری است. در مقاله حاضر، روش‌های رگرسیون کمینه مربعات معمولی[۱] (OLSR) و رگرسیون بردار پشتیبان[۲] (SVR) غیرخطی را برای پیش‌بینی‌کننده‌های متفاوت مقایسه می‌کنیم. در رگرسیون OLSR، ضرایب رگرسیون پیش‌بینی‌کننده‌ها، βها، با کمینه کردن تابع $L(\beta)$ با در نظر گرفتن n حاصل می‌شود. این تابع به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$L(\beta) = \|y - X\beta\|_2^2 \quad (۲)$$

که در آن $\|.\|_2$ نشان‌دهنده نرم L_2 است. X و y به ترتیب ماتریس پیش‌بینی و بردار n بعدی ویژگی هدف برای مجموعه داده آموزشی هستند [٤].

رگرسیون‌های غیرخطی برای بیان توابع پیچیده انعطاف‌پذیر هستند. SVR یک روش رگرسیون غیرخطی براساس ترفند کرنل[۳] است. در حقیقت SVR نسخه‌ای از ماشین بردار پشتیبان[٤] (SVM) برای رگرسیون است که تابع کرنل فضای ویژگی اصلی داده‌های در نظر گرفته شده را در فضایی با ابعاد بالا ترسیم می‌کند، جایی که کار یادگیری ساده شده است. در این جا، ما از SVR با تابع گاوسی استفاده می‌کنیم[٥-٤].

تابع کرنل گاوسی بین دو نقطه داده x و x' با پارامتر σ^2 به صورت زیر تعریف شده است[٦-٥]:

$$k(x, x') = exp\left(-\frac{\|x - x'\|^2}{2\sigma^2}\right) \quad (۳)$$

[1] Ordinary Least Square Regression
[2] Support Vector Regression
[3] Kernel trick
[4] Support Vector Machine

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

نتایج

در این مقاله، ما ابتدا یک مجموعه داده از ۲۳۵ ترکیب معدنی ایجاد کردیم[۱۰-۷]. پیش‌بینی‌کننده اصلی در این مجموعه داده گاف انرژی است. علاوه بر گاف انرژی ۵ متغیر دیگر مربوط به عناصر تشکیل دهنده ترکیب معدنی نیز به عنوان کاندیدای پیش‌بینی‌کننده در نظر گرفته شد. این ۵ ویژگی شامل دوره تناوب عنصر در جدول تناوبی، عدد اتمی، جرم اتمی، الکترونگاتیویتی و انرژی اولین یونیزاسیون است. برای یک ترکیب معین، پیش‌بینی‌کننده‌های خاص عنصر به شکل‌های میانگین ،$\langle\xi\rangle$ ، و انحراف استاندارد ،σ_ξ ، ساخته می‌شوند:

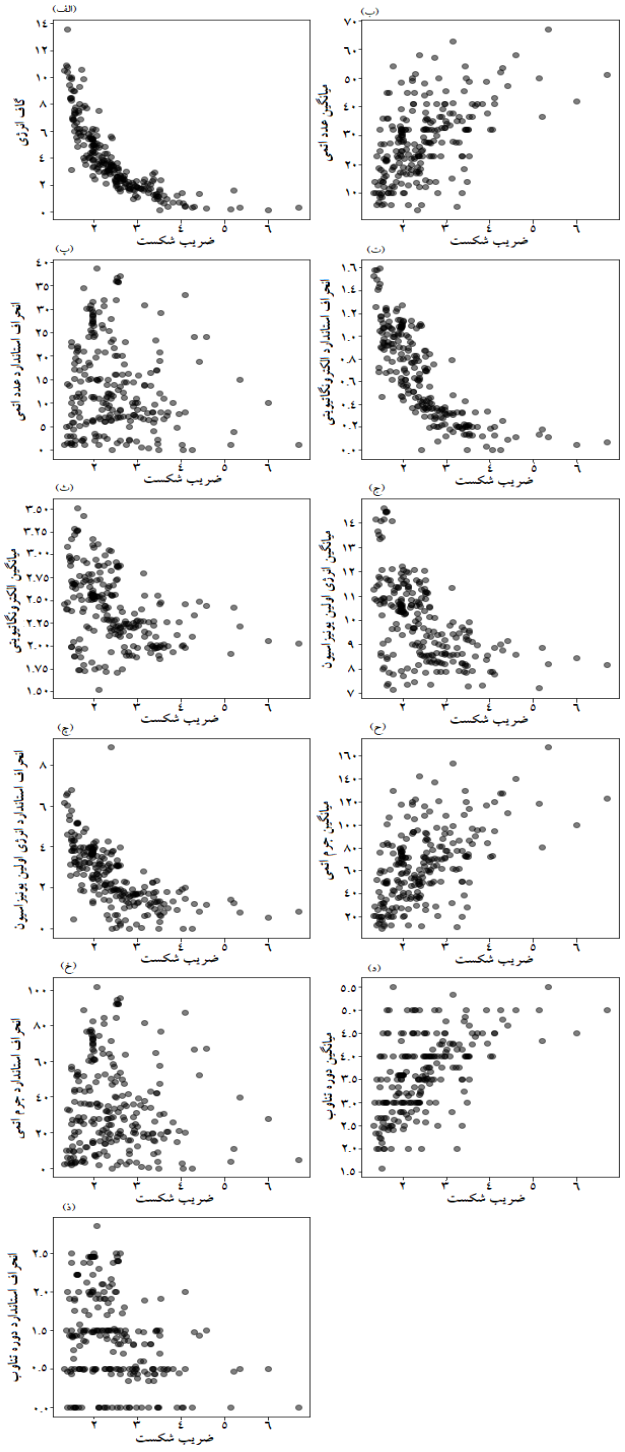
$$\langle\xi\rangle = \sum_k^N x_k \xi_k \qquad (۴)$$

$$\sigma_\xi = \sqrt{\sum_k^N x_k (\xi_k - \langle\xi\rangle)^2} \qquad (۵)$$

که در آن x_k و ξ_k به ترتیب ترکیب و متغیرهای اساسی هر عنصر تشکیل‌دهنده هستند و همه آن‌ها در مجموعه ۱۱ پیش‌بینی‌کننده گنجانده شده‌اند.

با استفاده از مجموعه ۱۱ پیش‌بینی‌کننده مدل‌های پیش‌بینی با ۲ روش رگرسیون OLSR و SVR ساخته شدند. شکل ۱ رابطه هر یک از ویژگی‌ها با ضریب شکست را نشان می‌دهد. همان‌طور که از قسمت (الف) شکل ۱ پیدا است گاف انرژی رابطه خوبی با ضریب شکست دارد. همچنین می‌توان دید ویژگی‌های مربوط به الکترونگاتیویتی و انرژی اولین یونیزاسیون نیز رابطه نسبتا خوبی با ضریب شکست دارند. در شکل۲ نیز می‌توان همبستگی ویژگی‌ها با یکدیگر و ضریب شکست را مشاهده کرد.

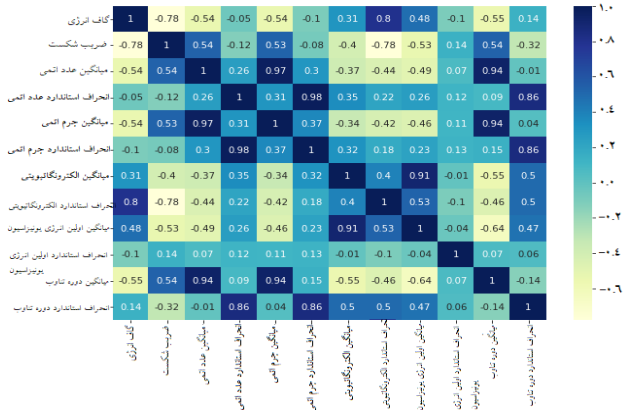
در ادامه، وابستگی خطای جذر میانگین مربعات (RMSE) داده‌های آزمون با توجه به تعداد داده‌های آموزشی مورد بررسی قرار گرفت. در شکل ۳ این وابستگی خطا برای ۳۰۰ پیکربندی در راستای به دست آوردن میانگین و انحراف استاندارد قابل مشاهده است.



شکل ۱: بررسی رابطه پیش‌بینی‌کننده‌ها با ضریب شکست

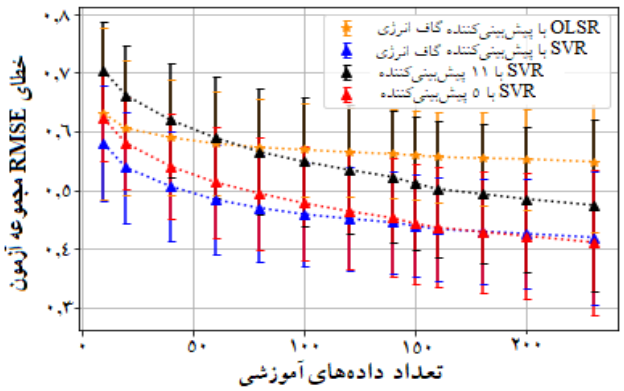
رگرسیون‌ها با استفاده از ویژگی اصلی گاف انرژی مورد بررسی قرار گرفتند تا مبنای خوبی برای بررسی سایر پیش‌بینی‌کننده‌ها باشند.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل۲: میزان همبستگی پیش‌بینی‌کننده‌ها با هم و با ضریب شکست

در قدم بعدی همه ۱۱ ویژگی به عنوان پیش‌بینی‌کننده استفاده شدند که همان‌طور که شکل ۳ قابل مشاهده است RMSE در این حالت نسبت به حالتی که تنها پیش‌بینی‌کننده گاف انرژی است افزایش می‌یابد. با توجه به بررسی‌های صورت گرفته در شکل ۱ و ۲، ویژگی‌های الکترونگاتیویتی و انرژی اولین یونیزاسیون علاوه بر گاف انرژی رابطه همبستگی بهتری نسبت به سایر ویژگی‌ها با ضریب شکست دارند، در نتیجه با حذف سایر ویژگی‌ها رگرسیون SVR این بار فقط با ۵ پیش‌بینی‌کننده برازش شد.



شکل۳: وابستگی خطای RMSE به تعداد داده‌های آموزشی برای چهار مدل. میله‌های خطا نشان‌دهنده انحراف استاندارد برای ۳۰۰ پیکره‌بندی مختلف هستند.

با این که SVR با این ۵ پیش‌بینی‌کننده در ابتدا خطای بیش‌تری نسبت به ۱۱ پیش‌بینی‌کننده دارد، اما با افزایش تعداد داده‌های آموزشی این خطا کاهش پیدا می‌کند. به بیان دقیق‌تر با افزایش تعداد داده‌های آموزشی به ۱۶۰ داده، خطاهای دو روش تقریبا یکسان و با افزایش بیش‌تر تعداد داده‌های آموزشی، SVR با ۵ پیش‌بینی‌کننده کم‌ترین مقدار خطا را پیدا می‌کند.

از نکات قابل توجه در نمودار ۳ این است که برای روش OLSR با گذشتن از ۵۰ داده آموزشی اشباع دیده می‌شود و با افزایش تعداد داده خطا تغییر محسوسی نمی‌کند، در روش SVR با تنها یک ویژگی گاف انرژی شیب کمتری نسبت به دو حالت بررسی با ۱۱ و ۵ ویژگی دارد و به نظر می‌رسد با افزایش ویژگی‌ها خطای کمتری مشاهده خواهد شد. با این حال، تعداد داده‌های آموزشی باید با در نظر گرفتن رابطه مبادله بین هزینه محاسباتی و زمانی و قدرت پیش‌بینی انتخاب شود. این مدل می‌تواند برای ایجاد یک پایگاه داده بزرگ از ضریب شکست با دقت معقول مفید باشد.

نتیجه‌گیری

در این مقاله، ما مدل‌های پیش‌بینی ضریب شکست را برای ۲۳۵ ترکیب معدنی با استفاده از گاف انرژی، الکترونگاتیویتی، انرژی اولین یونیزاسیون و سایر ویژگی‌های اتمی به عنوان پیش‌بینی‌کننده توسعه دادیم. در روش OLSR با افزایش تعداد داده‌های آموزشی خیلی زود به اشباع رسیدیم، وقتی پیش‌بینی با روش SVR انجام شد خطا به صورت قابل ملاحظه‌ای کاهش پیدا کرد و همچنین مشاهده شد که با افزایش تعداد داده‌های آموزشی، خطا روند نزولی قابل توجه خود را حفظ می‌کند. با توجه به این نتایج می‌توان با صرف هزینه محاسباتی بسیار کم‌تر به مجموعه داده‌ای قابل قبول از ضرایب شکست ترکیب‌های معدنی دست یافت.

مرجع‌ها

[1] J. Zhao and J. M. ColeJ. Chem. Inf. Model; J. Chem. Inf. Model. **62**, 11, (2022) 2670–2684.
[2] A.S. Korotkov n, V.V. Atuchin; J. Phy. and Chem. Solids **71,** (2010) 958–964.
[3] Fox, M. *Optical Properties of Solids*, Oxford Master Series in Physics; OUP Oxford, (2010).
[4] J. Lee, A. Sek Phys. Rev. B **93**, (2016) 115104.
[5] A. J. Smola and B. Scholkopf, ¨ Stat. Comput. **14**, (2004) 199.
[6] B. Scholkopf, A. Smola, and K. R. Muller; Neural Comput. **10**, (1998) 1299.
[7] M. J. Weber, *Handbook of Optical Materials*, 1st ed. (CRC Press, Boca Raton, FL, 2002).
[8] W. M. Haynes, *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 92nd ed. (CRC Press, Boca Raton, FL, 2012).
[9] Ya Zhuo, A. M.Tehrani, and J. Brgoch; J. Phys. Chem. Lett., **9**(7), (2018) 1668-1673.
[10] LWang, L.Tan, T. Hou, J. Shi; J. Luminescence, **134**, (2013) 319-324.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مطالعه اصول اولیه خواص الکترونی، مغناطیسی و نیم‌فلزی آلیاژهای نیم‌هویسلر KCaGe و KSrGe: با نرم‌افزار WIEN2k

صفوی ، مریم ؛ دعوت‌الحق ، سعید

بخش فیزیک، پردیس علوم، دانشگاه شیراز ، شیراز ۷۱۹۴۶

چکیده

در سال‌های اخیر، تحقیق بر روی مواد نیم‌هویسلر به روند جدیدی در جستجوی مواد جدید برای کاربرد در صنعت اسپینترونیک تبدیل شده است. بنابراین ما در این مقاله خواص الکترونی، مغناطیسی و نیم‌فلزی ترکیبات نیم‌هویسلر KCaGe و KSrGe را بر اساس نظریه تابعی چگالی با استفاده از کد محاسباتی WIEN2k مورد بررسی قرار داده‌ایم. که نتایج مقدار مغناطش یک مگنتون بوهر برای هر دو ترکیب نشان داده‌اند، علاوه بر این هر دو ترکیب دارای خاصیت نیم‌فلزی می‌باشند که مقدار گاف نیم‌فلزی برای KCaGe و KSrGe به ترتیب ۰,۳۸ و ۰,۲۹ الکترون ولت به دست آمده است. مقادیر انرژی تشکیل برای هر دو ترکیب منفی به دست آمده است که نشان دهنده‌ی پایداری شیمیایی این ترکیبات در برابر واپاشی به عناصر سازنده است.

واژه های کلیدی: *ترکیبات نیم‌هویسلر، مواد نیم‌فلزی.*

First principles study of electronic, magnetic and half-metallic properties of KCaGe and KSrGe half-Heusler alloys: by WIEN2k package

Safavi, Maryam ; Davatolhagh, Saeid

Department of Physics, school of science, Shiraz University, Shiraz 71946

Abstract

In recent years, the investigation on half-Heusler materials has become a new trend in the search of novel materials for use in the spintronic industry. Therefore, in this paper, we investigate the electronic, magnetic and half-metallic properties of KCaGe and KSrGe half-Heusler compounds based on density functional theory using the WIEN2k computational code. The results show that the magnetization value is $1\mu_B$ for both compounds, in addition, both compounds have half-metallic properties, which the half-metallic gap for KCaGe and KSrGe is 0.38 and 0.29 eV, respectively. The formation energy values for both compounds are negative, that indicated the chemical stability of these compounds against decay to the constituent elements.

***Keywords**: half-Heusler compounds, half-metallic materials.*

PACS No. (11 Times New Roman, italic)

مقدمه

در سال‌های اخیر، مواد نیم‌فلزی با توجه به پتانسیل متمایز آن‌ها برای کاربرد در صنعت اسپینترونیک و فناوری نانو، توجه عمده‌ی محققان را به خود جلب کرده است [۱]. این مواد، رفتار یک عایق یا نیمه‌رسانا را در یک کانال اسپینی و رفتار فلزی در کانال اسپینی دیگر نشان می‌دهد. که این رفتار سبب قطبش اسپینی ۱۰۰ درصد مواد نیم‌فلزی می‌شود [۲]. در واقع، این خاصیت برای اولین بار توسط گروت و همکارانش، در ترکیب نیم‌هویسلر NiMnSb پیش‌بینی شد [۳]. از آن زمان به بعد این حوزه از علم مواد توجه

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

ویژه‌ای را به خود اختصاص داد. تاکنون نیم‌فلزات زیادی به صورت آزمایشگاهی و نظری کشف شده‌اند که دارای ساختارهای متفاوتی مانند: تمام‌هویسلر [٤]، نیم‌هویسلر [٥]، اکسیدهای فلزی [٦]، ساختار ورتزایت [٧] و... بوده‌اند. که در میان این مواد ترکیبات نیم‌فلز مبتنی بر آلیاژهای تمام هویسلر و نیم‌هویسلر دارای اهمیت فراوانی است و نقش مهمی در کاربردهای اسپینترونیک ایفا می‌کنند، زیرا این ترکیبات دارای دمای کوری نسبتا بالایی هستند و از آن‌جایی که دارای ساختار مشابه‌ای با نیمه‌رساناهای با ساختار بلند-روی هستند دارای کابرد فراوان صنعتی می‌باشند [٨]. آن‌ها اخیراً در حسگرهای مغناطیسی، حافظه‌های دسترسی تصادفی مغناطیسی غیر فرار و ... مورد استفاده قرار گرفته‌اند[٩]. فرمول کلی آلیاژهای نیم‌هویسلر به صورت XYZ می‌باشد، که اتم X و Y کاتیون و اتم Z آنیون است. شکل ساختاری این ترکیبات همانند یک شبکه fcc با پایه سه اتمی می‌باشد یا به عبارتی دیگر همانند سه شبکه fcc می‌باشد که درون هم قرار گرفته‌اند و نسبت به هم-دیگر در راستای قطر اصلی به اندازه (۰,۲۵، ۰,۲۵، ۰,۲۵) جابه‌جا شده‌اند. ساختارهای نیم‌هویسلر بر اساس این که کدام عنصر در وسط قرار بگیرد سه پیکربندی متفاوت می‌تواند داشته باشد. به ترتیب اگر عناصر X، Y و Z وسط قرار بگیرد فازهای آلفا (α)، بتا (β) و گاما (γ) نامیده می‌شوند.

به دلیل اهمیت ویژه مواد نیم‌هویسلر و خواص نیم‌فلزی، در این مقاله،ما ترکیبات نیم‌هویسلر KCaGe و KSrGe را که کاتیون‌ها از عناصر d^0 می‌باشند را انتخاب کردیم و خواص پایداری، الکترونی، مغناطیسی و نیم‌فلزی این ترکیبات نیم‌هویسلر را مورد بررسی قرار دادیم. چنین ترکیبات نیم‌هویسلری که درآن عناصر واسطه حذف شده است نیم‌هویسلرهای d^0 نامیده می‌شوند که اگر خاصیت نیم‌فلزی در این ترکیبات دیده شود دارای اهمیت ویژه‌ای نسبت به دیگر نیم‌فلزات هستند زیرا مقدار گشتاور مغناطیسی کمتری دارند و استفاده آن‌ها در دستگاه‌ها دارای حداقل تلفات انرژی است [٨].

روش محاسبات

خواص الکترونی، مغناطیسی و پایداری شیمیایی ساختار با حل معادلات کوهن-شم بر اساس اصول اولیه با استفاده از نظریه تابعی چگالی در کد محاسباتی WIEN2k انجام شده است. در این کد محاسباتی، خواص فیزیکی بر اساس روش تمام پتانسیل- امواج تخت بهبود یافته خطی محاسبه می‌شود. که در این مقاله بر اساس بهینه‌سازی، $R_{MT} \times K_{max}=8$، $L_{max}=10$ و $G_{max}=14$ a.u^{-1} انتخاب شده است. جهت محاسبه ثابت شبکه بهینه، از برازش معادله حالت مورناگان با منحنی انرژی کل بر حسب حجم استفاده شده است.

بحث و نتایج

برای به دست آوردن ثابت شبکه بهینه و ساختار پایدارتر، ابتدا منحنی انرژی کل بر حسب حجم برای پیکربندی‌های مختلف آلیاژ نیم‌هویسلر، بر اساس معادله حالت مورناگان مورد بررسی قرار گرفت. همان‌طور که در شکل ۱ برای ترکیب نیم‌هویسلر KCaGe قابل مشاهده است، در بین سه فاز متفاوت موجود، فاز β پایدارتر می‌باشد. برای ترکیب نیم‌هویسلر KSrGe نیز فاز β پایدارتر است، از آن‌جایی که نمودارها برای ترکیب نیم‌هویسلر KSrGe به طور مشابه با ترکیب KCaGe است از آوردن تصاویر مشابه خودداری کرده‌ایم و نتایج لازم فقط گزارش شده است. در مرحله بعد، حالت‌های مغناطیسی متفاوت مورد بررسی قرار گرفته است، به عبارتی منحنی‌های انرژی کل بر حسب حجم مربوط به فاز β در حالت‌های غیرمغناطیسی، فرومغناطیسی و آنتی‌فرومغناطیس برای هر دو ترکیب نیم‌هویسلر، مورد بررسی قرار گرفت که نتایج نشان دهنده‌ی حالت پایدارتر فاز مغناطیسی می‌باشند. نمودار مربوط به ترکیب نیم‌هویسلر KCaGe در شکل ۲ گزارش شده است. بر اساس نمودارهای موجود، ثابت شبکه بهینه محاسبه شده است که برای هر دو ترکیب در جدول ۱ ارائه شده است، و همان‌طور که قابل انتظار است به دلیل بزرگ‌تر بود شعاع اتمی Sr نسبت به Ca، مقدار ثابت شبکه ترکیب نیم‌هویسلر KSrGe بزرگتر می‌باشد. اکنون جهت بررسی پایداری شیمیایی این ترکیبات نیم‌هویسلر در برابر واپاشی به عناصر سازنده اصلی، به محاسبه مقادیر انرژی تشکیل پرداخته می‌شود، که انرژی تشکیل بر اساس رابطه زیر محاسبه شده است:

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

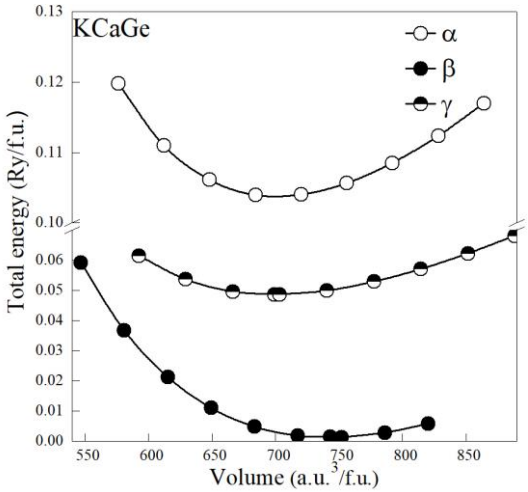
$$\Delta E_f = E_{XYZ} - (E_X + E_Y + E_Z) \quad (۱)$$

و E_{XYZ} و E_iها به ترتیب مقدار انرژی کل فاز پایدارتر بر واحد فرمول و مقدار انرژی بر واحد اتم مربوط به اجزای سازنده در ساختار تعادلی می‌باشد. مقادیر به دست آمده برای انرژی تشکیل یک مقدار منفی است که برای هر دو ترکیب نیم‌هویسلر مورد بررسی، در جدول ۱ گزارش شده است. این مقادیر منفی به معنای پایداری شیمیایی ترکیبات در برابر واپاشی به عناصر سازنده می‌باشد. حال پس از بررسی پایداری ترکیبات نیم‌هویسلر مورد نظر، به بررسی خواص مغناطیسی و الکترونی این ترکیبات پرداخته می‌شود. مقدار گشتاور مغناطیسی کل محاسبه شده برای هر دو ترکیب .برابر با یک مگنتون بوهر می‌باشد که در جدول ۱ ارائه شده است. این مقدار به دست آمده مطابق با انتظار بر اساس قانون اسلایتر پائولینگ می‌باشد. مقدار صحیح این گشتاور مغناطیسی کل می‌تواند یک نتیجه امیدوار کننده باشد برای این‌که ترکیبات مورد بررسی دارای خاصیت نیم‌فلزی باشند، اما در واقع این مقدار صحیح بودن یک شرط لازم است ولی کافی نیست. بنابر این باید دیگر نشانه‌ها مورد بررسی قرار بگیرد. در شکل ۳، نمودار چگالی حالت‌ها و ساختار نواری برای حالت اسپین بالا، ترکیب نیم‌هویسلر KCaGe گزارش شده است. در این شکل دیده می‌شود که سطح فرمی برای این ترکیب نیم‌هویسلر در منطقه گاف نواری قرار می‌گیرد و همان‌طور که از نمودار چگالی حالت‌ها قابل مشاهده است اتم Ge نسبت به دیگر اتم‌ها، سهم بیشتری در حالت‌های نزدیک به سطح فرمی دارد. اکنون اگر این شکل را با شکل ٤ که ساختار نواری و نمودار چگالی حالت‌های اسپین پایین برای ترکیب KCaGe را نشان می‌دهد، مقایسه کنیم خواهیم دید که برخلاف حالت‌های اسپین بالا، برای حالت‌های اسپین پایین، در سطح فرمی حالت‌های الکترونی موجود است. بنابراین می‌توان به قطعیت گفته شود که این ترکیب یک نیم‌فلز می‌باشد. نمودارهای مربوط به ترکیب KSrGe نیز چنین خاصیتی را نشان می‌دهند. در پایان، مقادیر گاف نیم‌فلزی که کمترین انرژی لازم برای یک الکترون است تا اسپین آن تغییر کند، محاسبه شده است، این مقدار برای ترکیبات KCaGe و KSrGe به ترتیب ۰,۳۸ و ۰,۲۹ الکترون ولت محاسبه شده است که در جدول ۱، این مقادیر گزارش شده است.

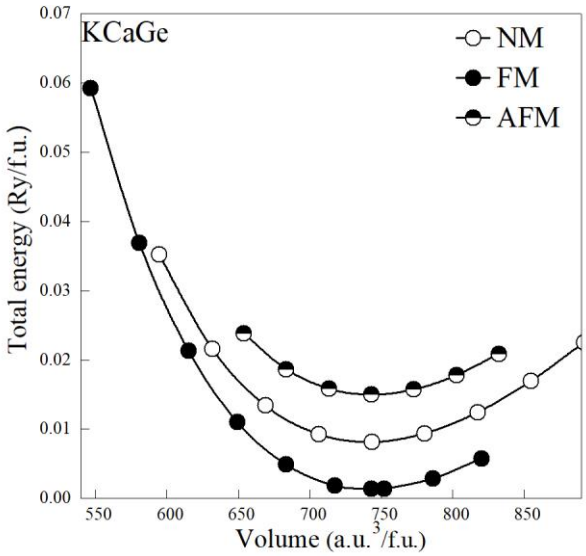
جدول‌ها و شکل‌ها

جدول ۱ : ثابت شبکه بهینه a بر حسب آنگستروم، انرژی تشکیل ΔE_f بر حسب میلی الکترون ولت بر اتم ، M_{tot} مغناطش کل (μ_B) و E_{HM} گاف نیم‌فلزی بر حسب الکترون ولت .

ترکیب	a	ΔE_f	M_{tot}	E_{HM}
KCaGe	۷,٦۱	-۸۱,۷	۱,۰	۰,۳۸
KSrGe	۷,۸٤	-۲۵,۷	۱,۰	۰,۲۹

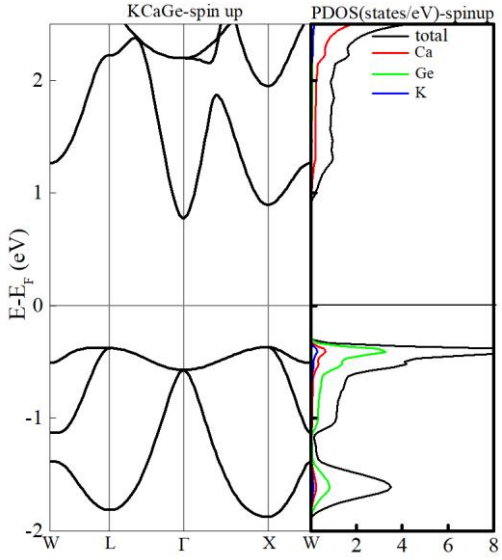


شکل ۱: انرژی کل بر حسب حجم برای سه ترکیب‌بندی متفاوت ترکیب نیم‌هویسلر KCaGe.

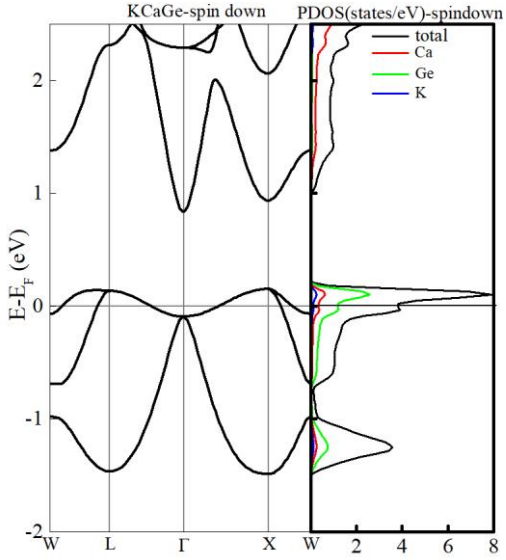


شکل ۲: انرژی کل بر حسب حجم در سه حالت فرومغناطیسی، آنتی فرومغناطیسی و غیرمغناطیسی ترکیب نیم‌هویسلر KCaGe.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل ۳: ساختار نواری و نمودار چگالی حالت جزئی الکترون‌های اسپین بالا برای ترکیب نیم‌هویسلر KCaGe.



شکل ٤: ساختار نواری و نمودار چگالی حالت جزئی الکترون‌های اسپین پایین برای ترکیب نیم‌هویسلر KCaGe.

نتیجه گیری

در این مقاله، ترکیبات نیم‌هویسلر KCaGe و KSrGe مورد بررسی قرار گرفته است. در بین سه نظم ممکن برای ترکیبات نیم-هویسلر، برای هر دو ترکیب فاز β پایدارتر است. همچنین نمودار انرژی بر حسب حجم را برای سه حالت‌های متفاوت غیرمغناطیسی، فرومغناطیسی و آنتی‌فرومغناطیسی را مورد بررسی قرار گرفت که فاز فرومغناطیسی پایدارتر است. مقدار منفی انرژی تشکیل به دست آمده حاکی بر پایداری شیمیایی ترکیبات می‌باشد. مقدار مغناطش یک مگنتون بوهر، ساختار نواری و نمودار چگالی حالت‌ها برای اسپین بالا و پایین نشان دهنده‌ی خاصیت نیم‌فلزی در این ترکیبات می‌باشد.

مرجع‌ها

[۱] A. Abada and N. Marbouh; "study of new d^0 half-metallic half-Heusler alloy MgCaB: first- principles calculations" *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism* **33**, No. 3 (2020): 889-899.

[۲] H. Rozale, A. Amar, A. Lakdja, A. Moukadem, A. Chahed; "Half-metallicity in the half-Heusler RbSrC, RbSrSi and RbSrGe compounds" *Journal of magnetism and magnetic of materials* **336**, (2013) 83-87.

[۳] R. D. Groot, F. Mueller, P. V. Engen, and K. Buschow; " New class of materials: half-metallic ferromagnets" *Physical Review Letters* **50**, No. 25 (1983): 2024.

[٤] A. Birsan, V. Kuncser; "First principle investigations of the structural, electronic and magnetic properties of predicted new zirconium based full-Heusler compounds, Zr_2MnZ (Z=Al, Ga and In)" *Journal of magnetism and magnetic of materials* **406**, (2016): 282.288.

[٥] M. Allaf Behbahani, M. Moradi, M. Rostami, S. Davatolhagh; "First principle study of structural, electronic and magnetic properties of half-Heusler IrCrZ (Z=Ge, As, sn and sb) compounds" *Journal of Physics and Chemistry of solids* **92** (2016): 85-93.

[٦] S. M. Watts, S. Wirth, S. Von Molnar, A. Barry, J. M. D. Coey; "Evidence for two-band magnetotransport in half-metallic chromium dioxide" *Physical Review B* **61,** No. 14 (2000): 9621.

[۷] M. Moradi, M. Rostami, M. Afshari; "Half-metallic ferromagnetism in wurtzite and rocksalt TiTe: A density functional theory study" *computational materials science* **62** (2013): 278-283.

[۸] M. Safavi, M. Moradi and M. Rostami; "Structural, electronic and magnetic properties af NaKZ (Z= N, P, As, and Sb) half-Heusler compounds: a first-principles study" *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism* **30**, No. 4 (2017): 989-997.

[۹] J. Atulasimha and S. Bandyopadhyay; "Nanomagnetic and spintronic devices for energy-efficient memory and computing" (2016).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تاثیر دمای محیطی بر قطر نانولوله های بورونی در هنگام رشد به روش تبخیر حرارتی

اطهری پور، زهرا[۱] ؛ سعیدی، محمدرضا[۲]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه شاهد، روبروی حرم مطهر امام خمینی (ره)، تهران

[۲] گروه فیزیک، دانشگاه شاهد، تهران

چکیده

در این مقاله یک مدل فیزیکی جدید برای توصیف وابستگی طول نانولوله بورونی به دما ارائه شده است. این مقاله با استفاده ازشبیه سازی جرم و فنر، مدلی مناسب برای رشد نانولوله های بورونی ارائه می کند و تاثیر عامل دما بر رشد نانولوله را بررسی می کند.

واژه های کلیدی: *نانولوله بور، تبخیر حرارتی، تعامل واندروالس، ارتعاش فونون، نظریه جنبشی گازها.*

Environmental effect on the diameter of boron nanotubes during growth by thermal evaporation

Atharipour, Zahra[1]; Saeidi, Mohamadreza[2]

[1] *Department of Physics, University of shahed, Tehran*

[2] *Department of Physics, Shahed University, Tehran*

Abstract

In this paper, a new physical model is proposed to describe the temperature dependence of the boron nanotube length. Using mass and spring simulations, this paper presents a suitable model for the growth of boron nanotubes and investigates the effect of temperature factor on the growth of nanotubes.

Keywords: *Boron nanotube, thermal evaporation, van der Waals interaction, Phonon vibration, Kinetic theory of gases*

مقدمه

از زمان کشف نانولوله های کربنی (CNT) [۱]، ساخت و کاربرد نانولوله های تولید شده از مواد دیگر به دلیل خصوصیات جالب فیزیکی، شیمیایی و مکانیکی [۲-٤] مورد توجه قرار گرفته است که پیشرفت چشمگیری در صنعت و فناوری ایجاد می کند. علاوه بر نانولوله های کربنی شناخته شده (CNT)، مواد معدنی مختلف دیگری نیز وجود دارند که ترکیبات نانولوله را تشکیل می دهند[۵]. ماده ای که در ابتدا توسط تئوری [٦] پیش بینی شده بود، نانولوله های ساخته شده از بور خالص است. پایداری و خصوصیات مکانیکی نانولوله های بور (BNT) باید کاملاً شبیه نانولوله های کربنی و بورون نیترید باشد[۷]. برای نخستین بار در سال ۲۰۰٤ سنتز نانولوله های بورونی تک جداره ، توسط سیوپارو و همکارانش از طریق واکنش BCl_3 با H_2 بر روی یک کاتالیزور Mg-MCM-41 انجام شد[۸]. در این مقاله اثر سرعت رشد دما بر رشد نانولوله های بورونی بررسی می شود. شبیه سازی از این تئوری با نتایج تجربی گزارش شده مطابقت دارد.

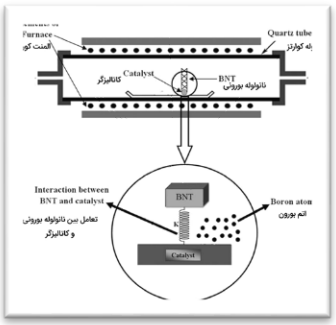
بخش تئوری

از میان تمامی روش های رشد، روش تبخیر حرارتی برای تولید این نانولوله ها مناسب تر است. این روش مزیت های فراوانی دارد [۹]. در این قسمت می خواهیم یک مدل جدید مبتنی بر تئوری جنبشی گازها[۱] و ارتعاشات فونون[۲] نانولوله بور (BNT) بر روی کاتالیزور برای توصیف مکانیسم رشد BNT در تبخیر حرارتی ارائه کنیم. تعامل بین BNT و کاتالیزور توسط پتانسیل لنارد-جونز[۲] بررسی می شود. نرخ رشد بهینه از دما برای رشد BNT را می توان از تئوری به دست آورد. همه نتایج با آزمایش های گزارش شده مطابقت دارند بنابراین می تواند در تحقیقات تجربی و نظری آینده برای بهینه سازی

[1] kinetic theory of gases
[2] Lennard-Jones potential

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

رشد BNT مفید باشد. به دلیل پیوند واندروالس[3] با کاتالیست، یک BNT در طول رشد به طور طولی روی کاتالیزور نوسان می کند. وقتی فاصله بین BNT و کاتالیزور بیشتر از قطر اتم بور باشد، ممکن است یک اتم بور بین کاتالیزور و لوله برای رشد بیشتر لوله درگیر شود. بنابراین انتظار می رود دامنه بحرانی نوسان[4] BNT، Aosc، برای رشد بیشتر از مرحله فعلی، باید برابر قطر اتم بور باشد. فعل و انفعالات واندروالس بین BNT و کاتالیزور آن توسط یک فنر شبیه سازی می شود، در همین حال BNT توسط یک جرم M(t) شبیه سازی می شود که در طول رشد در تئوری در حال افزایش است.



شکل ۱ : لرزش فونون BNT و تعامل آن با کاتالیزور در سیستم تبخیر حرارتی توسط سیستم چشمه جرم

اتمهای بور تجزیه شده تحت فشار جزئی، P و دمای محیط، سرعت حرارتی VT دارند. رشد یک BNT توسط حلقه ها توصیف می شود و هر حلقه از تعداد اتم های بور N ساخته می شود.

رشد نانولوله بر اساس قرارگیری حلقه هایی از بورون توصیف می شود. این حلقه ها شامل N اتم بور است. مثلا برای حلقهٔ بورون، تعداد اتم های هر حلقه را می توان از رابطه زیر محاسبه کرد:

$$N = \frac{\pi D}{D_{B-B}} \qquad (۱)$$

بنابراین، جرم BNT و تعداد اتم های بور در یک حلقه به صورت زیر است:

$$m(t)=n(t)Nm_B \qquad (۲)$$

n(t): تعداد حلقه هایی که در طول رشد افزایش می یابند

از آنجا که فقط اولین حلقه با کاتالیزور تعامل دارد، ضریب فنر (K) را تعریف می کنیم که نشان دهنده برهم کنش واندروالس بین هر دیواره و بستر است:

$$K=Nk \qquad (۳)$$

$$K = \frac{2E_{osc}}{A_{osc}^2} \qquad (٤)$$

نانولوله با فرکانس $\omega(t)$ و دوره تناوب T_{osc} بر روی کاتالیزور نوسان می کند، بنابراین بعد از گذشت مدت زمان $\frac{t}{T_{osc}}$ بار نوسان خواهد کرد. فرض بر آن است که در هر نوسان یک اتم مهاجر با احتمال β به نانولوله اضافه شود. برای آنکه یک حلقه کامل شود به N اتم مهاجر نیاز است، پس می توان از این رابطه برای محاسبهٔ تعداد حلقه بورون استفاده کرد:

$$n(t) = \frac{t}{NT_{osc}}\beta = \frac{\omega(t)}{2\pi N}t\beta \qquad (٥)$$

تابعی از فرکانس زاویه ای n (t) بدیهی است که تعداد حلقه ها، و زمان است که در زیر نشان داده شده است:ω (t)نوسان،

$$n(t) = \frac{\omega(t)}{2\pi N} \qquad (٦)$$

که در آن از رابطه زیر که همان فرکانس زاویه ای نانولوله است استفاده کرده ایم.

$$\omega(t) = \frac{2\pi}{T_{osc}} \qquad (٧)$$

فرض می کنیم نانولوله همان نوسانگر هماهنگ ساده است، داریم:

$$\omega(t) = \sqrt{\frac{K}{M(t)}} \qquad (٨)$$

با توجه به روابط (۲) تا (٤) و (۸) داریم:

$$\omega(t) = \sqrt{\frac{2E_{osc}}{n(t)A_{osc}^2 m_B}} \qquad (٩)$$

با استفاده از تعریف tبنابراین تعداد حلقه های تشکیل شده در زمان فرکانس زاویه ای نانولوله از رابطه زیر بدست می آید

$$n(t) = \sqrt{\frac{2E_{osc}}{n(t)\, m_B\, A^2}}\frac{t\beta}{2\pi N} \qquad (١٠)$$

و اگر فاصله میان دو حلقه متوالی را l_B در نظر بگیریم که برابر با ثابت شبکه است، طول نانولوله بعداز مدت زمان t:

$$L(t) = n(t)\, l_b \qquad (١١)$$

L(t) و l_B به ترتیب طول و فاصله بین دو حلقه هست.

معادله (۱۱) بدون در نظر گرفتن اثر میرایی بدست می آید. برای در نظر گرفتن اثر میرایی[5] ناشی از محیط باید معادله (۱۱) در $e^{-\eta t}$ ضرب شود. پارامتر η ضریب میرایی[6] است. فرضیه ای که در این

[3] van der Waals
[4] critical amplitude of oscillation
[5] damping effect
[6] damping factor

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تئوری به کار رفته این است که سرعت حرارتی اتم های بور مهاجر حاصل از تجزیه مواد اولیه، VT بی نهایت نیست.

$$L(t) = n(t)\, l_B\, e^{-\eta t} \quad (۱۲)$$

که در آن μ ضریب میرایی محیط می باشد که به شکل تجربی بدست آمده است. همانطور که پیشتر اشاره شد β احتمال پیوندزنی یک اتم مهاجر به نانولوله است که مقدار آن از رابطه $\beta = \frac{t_c(\min)}{t_c}$ در نظر گرفته شد، در این رابطه $t_c(\min)$ حداقل فاصله زمانی معنادار میان دو اتم مهاجر است و مقدار آن 10^{-12} است و:

$$t_c = \frac{l_{mfp}}{V_T} \quad (۱۳)$$

t_c (min): برابر با ۱۲-۱۰ ثانیه در نظر گرفته می شود.

از آنجاییکه $L_{mfp} = \frac{1}{\sqrt{2}\,\pi\, d^2 n_v}$ مسیر آزاد میانگین[7] بین دو اتم بور مهاجر است، d قطر اتم بور است که برابر با دامنه نوسان، A_{osc} است. فشار جزئی کم است و گاز اتم های بور مهاجر را می توان به عنوان گاز ایده آل در نظر گرفت که:

$$n_v = \frac{P}{k_B\, T} \quad (۱٤)$$

از تئوری جنبشی، اگر ذرات مهاجر سه درجه آزادی داشته باشند، می توانیم معادله زیر را داشته باشیم:

$$\frac{3}{2} k_b T = \frac{1}{2}\, m_B v_T^2 \quad (۱۵)$$

$$V_T = \sqrt{\frac{3\, K_B T}{m_N}} \quad (۱٦)$$

K_B : ثابت بولتزمن است که مقدار آن $1/38\times10^{-23}\ \frac{m^2 Kg}{S^2 K}$ است.

در مدل، ما فرض می کنیم که دما از ٤۰۰ درجه سانتیگراد با سرعت ثابت، q افزایش می یابد. به این معنی:

$$T = 400 + Qt \quad (۱۷)$$

E_{osc} انرژی نوسان است که همان انرژی واندروالس میان کاتالیزور و نانولوله می باشد که برحسب دما و پتانسیل لنارد-جونز میان نانولوله و کاتالیزور به شکل زیر است:

$$E_{osc} = E_0 \exp\left(\frac{۷\, U_{LT}}{\frac{1}{2} k_B\, T}\right) \quad (۱۸)$$

U_{LJ} و ۷، به ترتیب پتانسیل لنارد-جونز و ضریب اتمیسیمته هستند. $E_0 = 0.01|U_{LJ}|$ در مدل ارائه شده است. با توجه به روابط (۱) تا (۱۸) داریم:

$$L = \left(\frac{0.03\ A_{osc}\, d_{c-c}\, t_{c(min)} \sqrt{|U_{LJ}|}\, e^{\frac{۷\, U_{Lj}}{k_B(400+qt)}}}{\pi D m_c}\right)^{\frac{2}{3}} \left(\frac{P}{k_B(400+qt)}\right)^{\frac{1}{3}} t^{\frac{2}{3}}\, e^{-nt} l_c \quad (۱۹)$$

در ادامه با استفاده از رابطه بدست آمده برای طول نانولوله در روش تبخیر حرارتی، تاثیر دمای محیط رشد را روی رشد نانولوله بررسی می کنیم.

نتایج و بحث

میزان رشد نانولوله بورونی در دماهای مختلف بر روی کاتالیزور

شکل ۲ برای توصیف تغییر رشد BNT در مقابل دما و پتانسیل لنارد جونز (انرژی پیوند واندروالس) با پارامترهای زیر ارائه شده است:

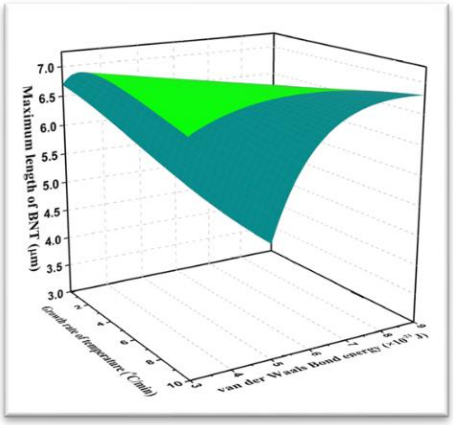
$$A_{osc} = 0.9\ A^0\ , l_B = 1.67\ A^0\ , d_{B-B} = 1.67\ A^0$$
$$k_B = 1.381 \times 10^{-23}\frac{j}{K}\ \ ,\ \ t_{c(min)} = 10^{-12} s$$
$$m_B = 17.95 \times 10^{-27} kg, \eta = 1.4 \times 10^{-4}\ s^{-1}$$
$$\gamma(for\ ideal\ gas) = \frac{5}{3}$$
$$P = 0.076\ Torr\ , D = 30nm\ , t = 100min$$

شکل (۲) نشان می دهد که:

۱-یک نرخ رشد دما وجود دارد که رشد BNT را بهینه می کند. به عنوان مثال، برای رشد BNT با آهن به عنوان کاتالیزور، سرعت مطلوب حدود ۸ درجه سانتی گراد در دقیقه است[۱۰]. از معادلات ۵ و۹، هنگامی که سرعت رشد دما افزایش می یابد، انرژی نوسان BNT با گذشت زمان افزایش می یابد. چنین افزایش انرژی نوسانی سریعتر از افزایش t_c است و از این رو رشد بر این اساس محکم می شود. با این حال، پس از یک نرخ رشد خاص دما، افزایش انرژی کندتر از افزایش t_c و در نتیجه β کاهش می یابد و منجر به رشد کندتر می شود. برای بدست آوردن حداکثر طول BNT می توان نرخ رشد مطلوب دما را محاسبه کرد.

[7] mean free path

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



. شکل۲ : مدل BNT و کاتالیزور آن در سیستم تبخیر حرارتی توسط سیستم چشمه جرم.

۲-یک کاتالیزور بهینه برای رشد BNT وجود دارد. طبق مدل توسعه یافته، انرژی نوسان با افزایش انرژی واندروالس تا یک مقدار مشخص افزایش می یابد. پس از این مقدار، انرژی نوسان کاهش می یابد زیرا، در این شرایط، انرژی پیوند بین بور و کاتالیزور آن بالاتر از انرژی گرمایی است که توسط BNT دریافت می شود. بنابراین، حرکت BNT محدود است و در نتیجه، روند رشد مختل می شود.

۳-همانطور که در شکل ۲ مشخص است، برای هر نوع کاتالیزور فقط یک نرخ رشد مطلوب دما وجود دارد. همچنین نشان می دهد هرچه انرژی بیشتر باشد، سرعت رشد مطلوب دما نیز بالاتر است. از آنجا که افزایش انرژی پیوند منجر به محدودیت حرکت در BNT می شود، بنابراین نرخ رشد مطلوب دما برای رشد BNT افزایش می یابد.

نتیجه گیری

در این مقاله یک مدل نظری برای رشد نانولوله های بورونی تک جداره ارائه کردیم. هدف از ارائه ی این مدل، بیان ریاضی وابستگی یک پدیده به شرایط محیطی است به طوریکه با استفاده از این مدل بتوان پدیده را کنترل کرد و به شرایط بهینه و مناسب رشد دست یافت. در این مدلسازی که بر اساس تئوری جنبشی گازها و ارتعاشات فونون اتم های موجود در ساختار شبکهٔ نانولوله بنا شده است، بر هم کنش میان نانولوله و کاتالیزور به وسیلهٔ دستگاه جرم فنر شبیه سازی می شود. در حقیقت برهم کنش واندروالس میان نانولوله و کاتالیزور توسط یک فنر شابیه سازی می شود و نانولوله نیز با جرم M(t) نشان داده شده است که با گذشت زمان مقدار آن افزایش می یابد.

نتایج نشان می دهد که رابطه بین طول BNT و نوع کاتالیزگر وجود یک کاتالیزور بهینه برای بهینه سازی رشد BNT ها در یک سرعت رشد خاص دما را نشان می دهد. از آنجا که تمام نتایج سازوکار ارائه شده با نتایج تجربی گزارش شده مطابقت دارد، بنابراین می تواند در تحقیقات تجربی و نظری آینده برای بهینه سازی رشد BNT مفید باشد.

مراجع

[۱] S.Iijima, “helical microtubules of graphitic carbon”, Nature. 354, (1991) 56-58.

[۲] R. T. Senger, and S. Dag, and S. Ciraci1, Dag, “Chiral Single-Wall Gold Nanotubes”, Phys. Rev. Lett. 93(2004) 196807.

[۳] L. Yadong, and W. Junwei, and D. Zhaoxiang, and W. Yiying, and S. Xiaoming, and Y. Dapeng, and Y Peidong, “Bismuth Nanotubes: A Rational Low-Temperature Synthetic Route”, J. Am. Chem. Soc. 123(2001) 9904-9905

[٤] X. Yang, and J. Ni, “Electronic properties of single-walled silicon nanotubes compared to carbon nanotubes”, Phys. Rev. 72(2005) 195426.

[٥] R.Tenne, and C.Rao, “Inorganic nanotubes”, R. Soc. 362(2004) 2099–2125

[٦] W.Lipscomb, and L.Massa, “Conjuncto Closo Boranes and Relationships to Dual Structures”, Inorg.Chem. 33(1994)5155-5156

[٧] J.Kunstmann, and A.Quandt, “Constricted boron nanotubes”, Chemical Physics Letters. 402(2005) 21–26

[٨] D.Ciuparu, and R.Klie, and Y.Zhu, and L.Pfefferle, “Synthesis of Pure Boron Single-Wall Nanotubes”, J. Phys. Chem. B. **108**(2014) 3967-3969

[٩] F.Liu, and C.Shen, and Z.Su, and X.Ding, and S.Deng, and J.Chen, and N.Xu,
and H.Gao, “Metal-like single crystalline boron nanotubes: synthesis and in situ study on electric transport and field emission properties”, Journal of Materials Chemistry. **20**(2010) 2197–2205

[۱۰] S.Betharia, “Boron”, Elsevier Inc. **1**(2005) 536-539

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تاثیر اندازه نانوذرات بر خواص ترموپلاسمونیک نانوفریم دایمرشش گوشی

نوری کوهانی، فهیمه[۱] ؛ آذریان، عباس[۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه قم ، انتهای بلوار محمد امین ، قم

چکیده

گرمای ناشی از تشدید پلاسمونی سطحی موضعی نانوذرات فلزی و کاربردهای فراوان آنها مانند ذخیره انرژی خورشیدی، درمان نور-گرمایی، نانوجراحی، نانوشیمی و طیف‌سنجی رامان در سال‌های اخیر مورد توجه قرار گرفته‌است. نانوذرات مانند منابع حرارتی با قابلیت کنترل از راه دور توسط نور به ظهور زمینه ترموپلاسمونیک منجر شده‌اند. این تغییرات گرمایی باعث افزایش دما در نانوذره و محیط اطراف می‌شوند. اندازه‌گیری گرمای تولید شده اساساً پیچیده است. در این مقاله به شبیه‌سازی تاثیر ابعاد نانوذرات در گرمایی که تولید می‌کنند و تغییرات دمایی آنها پرداخته شده است. اندازه ذرات یا درواقع شعاع محاطی آنها از ۵۰ نانومتر تا ۶۵ نانومتر تغییر داده شده است. در نهایت نشان داده شده است که با تغییر شعاع نانوذرات به اندازه ۱۵ نانومتر باعث ایجاد تغییرات دمایی حدود ۵ برابر شده است.

واژه های کلیدی: *پلاسمونیک، تشدید پلاسمون سطحی، خواص ترموپلاسمونیک، نانوذرات دوتایی، نانوذرات شش گوشی، ابعاد نانوذرات، ریخت‌شناسی .*

The effect of nanoparticle size on the thermoplasmics properties of the phone nanoframe dimmer

Noori Kohani, Fahimeh[۱]; Azarian, Abass[۱]

[۱] Department of Physics, university of Qom, Qom, I. R. Iran

Abstract

Heat due to localized surface plasmon resonance of metal nanoparticles and their many applications such as solar energy storage, light-heat treatment, nanosurgery, nanochemistry, and Raman spectroscopy have been considered in recent years. Nanoparticles, such as heat sources with remote control by light, have led to the emergence of thermoplasmonics backgrounds. These thermal changes cause the temperature in the nanoparticles and the environment to increase. Measuring the heat generated is fundamentally complex. In this paper, the effect of nanoparticle dimensions on the heat they produce and their temperature changes are simulated. The size of the particles, or their radius, has changed from 50 nanometers to 65 nanometers. Finally, it has been shown that changing the radius of nanoparticles by 15 nanometers, causes temperature changes of about 5 times.

***Keywords**: Plasmonic, Surface plasmon resonance, Thermoplasmonics, Nanoparticle dimensions, Morphology.*

PACS No. ۸۱

مقدمه

در سال‌های اخیر نانوذرات فلزی به دلیل خاصیت‌های اپتیکی و گرمایی بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند. یکی از دلایل عمده این توجه، ناشی از خاصیت منحصر به فرد پلاسمونیک نانوذرات فلزی است. هنگامی که سطح یک نانوذره فلزی مورد تابش نور واقع می‌شود، الکترون‌های رسانش در سطح آن به صورت جمعی شروع به نوسان می‌کنند، که به کوانتوم این نوسانات چگالی بار، پلاسمون

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

و به این نوسانات غیر انتشاری، پلاسمون سطحی جای‌گزیده[۱] (LSP) گفته می‌شود[۱].

یکی از کاربردهای مهم تشدید پلاسمون سطحی نانوذرات، تولید گرما در ابعاد نانومتری به کمک جذب نور فرودی است. از آنجا که نور جذب شده نهایتاً به گرما تبدیل می‌شود، کاربردهای فراوانی در فیزیک، شیمی، زیست‌شناسی و پزشکی دارد. لازم به ذکر است که این فرآیند تنها به تولید گرما ختم نمی‌شود، بلکه شامل انتقال گرما از نانوذرات به محیط اطراف نیز هست[۲].

نانوذرات بر اساس پارامترهایی مانند اندازه، شکل[۲]، جنس نانوذرات و یا محیط اطراف آنها دارای کاربردهای متفاوت فیزیکی، شیمیایی یا بیولوژیکی هستند. به این علت در این کار به بررسی تاثیر ابعاد نانوذرات در تغییرات دمایی که تولید می‌کنند، پرداخته شده است.

مبانی نظری

زمانی که نانوذرات فلزی در معرض میدان الکترومغناطیسی قرار می‌گیرند، بارهای آزاد نانوذرات با فرکانس میدان الکتریکی تابانده شده، نوسان می‌کنند. مقدار نور جذب شده توسط نانوذرات به سطح مقطع جذب(σ_{abs}) آن‌ها وابسته است که با رابطه زیر بیان می‌شود[۳]:

$$\sigma_{abs} = \frac{k}{\varepsilon_0 |E_0|^2} \int Im(\varepsilon_\omega)|E(r)|^2 dr \qquad (1)$$

در این رابطه $k=n\omega/c$ بردار موج، n ضریب شکست محیط اطراف، ε_ω تابع دی‌الکتریک ماده نانوذره، E_0 دامنه میدان الکتریکی نور فرودی و $E(r)$ میدان الکتریکی کل است. ضمن آنکه انتگرال بر روی حجم نانوذره گرفته می شود.

این نوسان الکتریکی ناشی از تابش نور فرودی که چیزی جز یک جریان الکتریکی در یک فلز نیست، باعث اتلاف انرژی می‌شود که به اثر گرمایش ژول معروف است[٤] و با مجذور میدان الکتریکی فرودی و تابع دی‌الکتریک نانوذره رابطه‌ای مستقیم دارد:

$$q(r) = \frac{\omega}{2}\varepsilon_0 Im(\varepsilon)|E(r)|^2 \qquad (2)$$

از سوی دیگر گرما در حجم مورد نظر را می‌توان به‌صورت تابعی از سطح مقطع جذب بیان کرد :

$$Q(r) = \sigma_{abs} I \qquad (3)$$

که در این رابطه $I=nc\varepsilon_0 E_0^2/2$ شدت تابش موج فرودی است.

نانوذرات در محیطی با رسانندگی گرماییκ، چگالیρ و ظرفیت گرمایی ویژه در فشار ثابت c_p تغییرات دمایی یا گرادیان دما ایجاد می‌کنند، به کمک گرمایش ژول، چگالی توان گرمایی در نانوذرات فلزی در هر زمان t و هر مکان r به صورت زیر خواهد بود[۱]:

$$\rho c_P \delta_t T - \kappa \nabla^2 T = q \qquad (4)$$

می‌توان این معادله را برای نانوذرات مختلف از جمله نانوفریم دایمر بررسی شده در این پژوهش، حل کرد و معادله توزیع دما در اطراف نانوذرات را به دست آورد[٥].

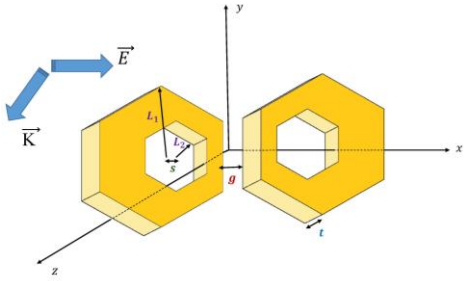
نتایج

در این مقاله سطح مقطع جذب نانوذرات به روش المان محدود در حوزه زمان(FDTD) محاسبه شده و سپس توزیع دما بر روی سطوح و محیط اطراف نانوذرات در طول موج (۷۸۵ nm) لیزر طیف سنجی رامان که لیزری پر کاربرد است، محاسبه گردید. در فلزات نجیب مانند طلا، طول موج تشدید پلاسمون سطحی در محدوده مرئی و مادون قرمز نزدیک طیف الکترومغناطیس واقع می‌شود. در این شبیه‌سازی از شدت $I=۱\ kW/m^۲$ استفاده شده است. ضمن آنکه نانوذرات از جنس طلا و بر روی زیرلایه‌ای از جنس آلومینا و در محیط هوا در نظر گرفته شده‌اند.

نانوذرات شبیه‌سازی شده به صورت دوتایی (دایمر) و متشکل از دو نانوذره شش ضلعی با ضخامت t= ۱۲ nm و شعاع محاطی $L_۱=٦۰$ nm (L) هستند. از طرفی نانوذرات دارای حفره‌ای با شعاع محاطی $L_۲=٤۰$ nm می‌باشند که را تبدیل به نانوفریم کرده است. فاصله مرکز حفره از مرکز نانوذره s=۱۸ nm و فاصله نانوذرات از هم g=۲ nm است. همچنین قطبش میدان الکتریکی در جهت محور x ها مطابق با شکل ۱. در نظر گرفته شده است.

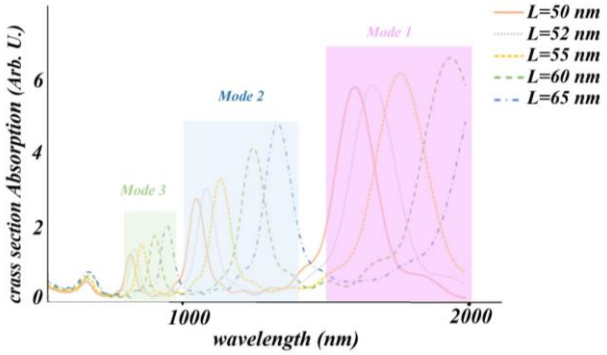
[۱] Localized Surface Plasmon
[۲] morphology

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



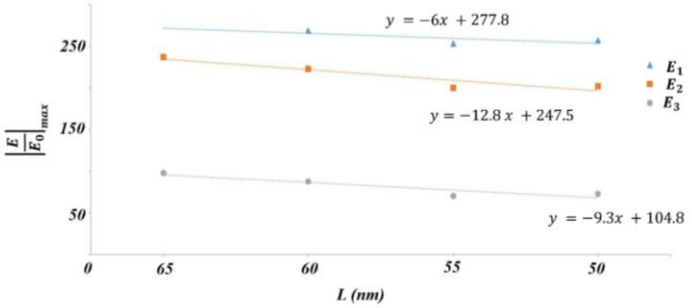
شکل ۱ : تصویر شماتیک پارامترهای هندسی نانوذرات شبیه‌سازی شده، جهت تابش و قطبش نور فرودی.

در این پژوهش اندازه ذرات یا درواقع شعاع محاطی آنها را از ۵۰ نانومتر تا ٦٥ نانومتر تغییر داده شده است. شکل ۲ تغییرات سطح مقطع جذب نانوذرات را به ازای مقادیر مختلف اندازه نانوذرات (L) را نمایش می‌دهد. با افزایش اندازه نانوذرات، طول موج تشدید پلاسمونی مربوط به تمامی طیف‌ها سه مد پلاسمونی هستند و همگی جابه‌جایی قرمز نشان می‌دهد. ارتفاع قله‌ها در هر سه مد با افزایش شعاع نانوذرات افزایش یافته و درضمن پهنای قله‌ها در هر سه مد تقریبا برابر است.

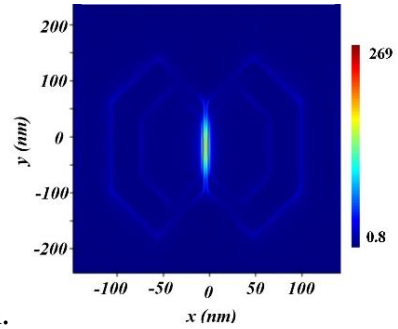


شکل ۲ : سطح مقطع جذب نانوذرات را به ازای مقادیر مختلف اندازه نانوذرات (L)

شکل ۳ تغییرات بیشینه نسبت میدان الکتریکی موضعی به میدان الکتریکی نور فرودی (ضریب تقویت میدان الکتریکی) برای مدهای اول، دوم و سوم به ازای مقادیر مختلف اندازه نانوذرات را نشان داده شده است. برای هر سه مد پلاسمونی با افزایش اندازه ذرات، ضریب تقویت میدان الکتریکی به علت افزایش عدم تقارن افزایش پیدا می‌کند. علاوه بر آن به ازای هر مقدار دلخواه، مد اول دارای مقدار ضریب تقویت میدان الکتریکی بیشتر نسبت به مد دوم و سوم است. بیشینه نسبت میدان الکتریکی را در مد اول L=٦٠ nm ($|E/E_0|_{max}$=٢٦٩) شاهد هستیم با توجه به مقادیردیگر میدان انتظار می‌رود بیشینه میدان در مد اول L=٦٥ nm اتفاق بیافتد اما پیک سطح مقطع جذب آن در منطقه شبیه‌سازی قرار ندارد. شکل ٤ نحوه توزیع ضریب تقویت میدان الکتریکی در مد اول L=٦٠nm نمایش می‌دهد.



شکل۳ : تغییرات بیشینه نسبت میدان الکتریکی موضعی به میدان الکتریکی نور فرودی برای مدهای اول و دوم و سوم به ازای مقادیر مختلف اندازه نانوذرات (L).



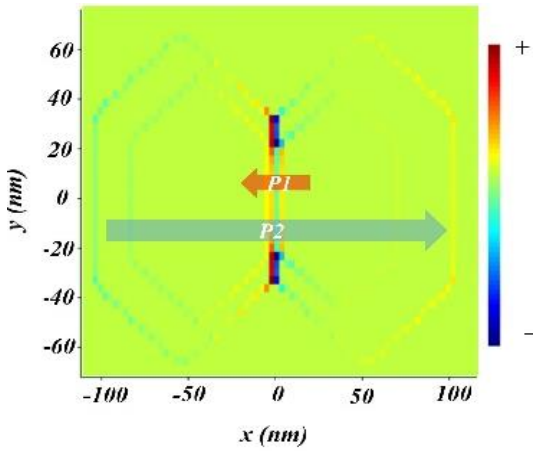
a.

شکل ٤ : تغییرات ضریب تقویت میدان الکتریکی مد اول L=٦٠nm

شکل ٥ تغییرات چگالی بار سطحی را برای L=٦٠nm نمایش می‌دهد. به منظور یافتن دلیل بروز قله‌های پلاسمونی در طیف جذب نانوذرات، توزیع چگالی بار به ازای هر یک از قله‌ها محاسبه گردید و این نتایج برای مد اول در شکل ٥ آورده شده است. الگوی چگالی بار برای مد اول به صورت یک برهمکنش دوقطبی_دوقطبی است و یک لکه داغ[۳] ناشی از دوقطبی P_1 در فاصله گپ میان دو نانوذره شکل گرفته‌است. لذا بیشینه شدت میدان الکتریکی در محل این دو قطبی (ناحیه میان گپ) بوجود آمده است.

[۳] Hot spot

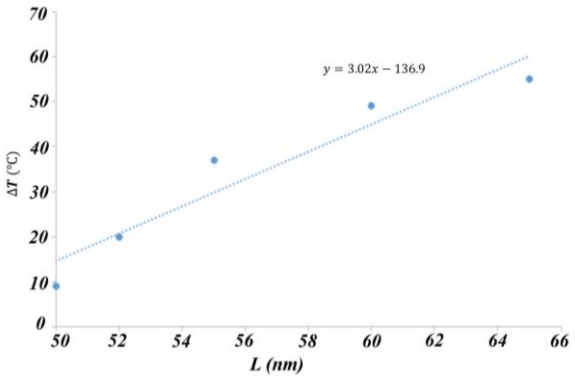
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل ۵ : تغییرات چگالی بار سطحی مد اول L=٦٠ nm

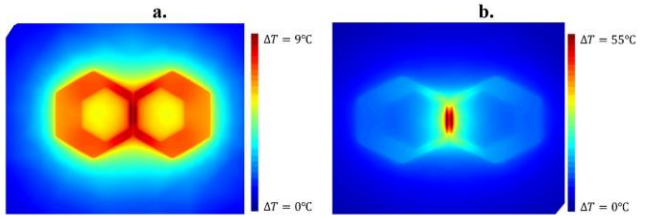
از آنجا که مطابق با رابطه (٤) چگالی توان حرارتی درون یک نانوذره با سطح مقطع جذب متناسب است. دمایی که نانودایمر طراحی شده در این مقاله، ایجاد می‌کند در طول موج ۷۸۵ نانومتر شبیه‌سازی شده است.

شکل ٦ تغییرات بیشینه دما بر حسب اندازه شعاع محاطی نانوذره را نمایش می‌دهد. با کاهش اندازه نانوذرات تغییرات دما نیز کاهش می‌یابد که با توجه به سطح مقطع طیف جذب که هرچه اندازه ذرات بزرگتر می‌شود رد شیفت پیدا می‌کند، مطابق است. در L=٦٥ nm شاهد بیشترین دما $\Delta T_{max}=٥٥^{\circ}C$ می‌باشیم و کمترین دما در L=٥٠ nm ($\Delta T_{max}=٩^{\circ}C$) دیده می‌شود.



شکل ٦: تغییرات بیشینه دما بر حسب اندازه شعاع محاطی نانوذره

شکل ۷ نقشه توزیع دما نانوذرات با شعاع محاطی ٥٠ nm و ٦٥ nm را نمایش می‌دهد. همان‌گونه در نقشه توزیع دما مشخص است، در نانوذرات با شعاع محاطی ٥٠ nm تغییر دما کمتر و توزیع دما نسبت به نانوذرات با شعاع محاطی ٦٥ nm گسترده‌تر است و در نانوذرات با شعاع محاطی ٦٥ nm دما به شدت در فاصله بین دو نانوذره افزایش یافته که به نقطه داغ مشهور است.



شکل ۷ : نقشه تغییرات دما نانوذرات با شعاع محاطی L=٥٠ nm و L=٦٥ nm را نمایش می‌دهد. a. توزیع تغییرات دما با مقدار $\Delta T_{max}=٩^{\circ}C$ b. توزیع تغییرات دما با مقدار L=٦٥ nm $\Delta T_{max}=٥٥^{\circ}C$

نتیجه‌گیری

نتایج پژوهش بیانگر این است که تغییر اندازه نانوذرات در دمایی که تولید می کنند به شدت تاثیر دارد و با تغییر فقط به اندازه ۱۵ نانومتر باعث ایجاد دمایی حدود ۵ برابر شده است. همچنین با افزایش ابعاد نانوذرات شاهد موضعی‌تر شدن گرما هستیم. که به علت نامتقارن بودن شکل نانوفریم‌ها، نیز عواملی چون دارا بودن گوشه‌ها و لبه‌های تیز در مورفولوژی نانوذرات، منجر به افزایش شدید دما روی سطح نانوذرات گردید که امکان استفاده عملی از این نانوذرات را در حوزه‌های مختلفی از علوم نشان می‌دهد.

مرجع‌ها

[۱] G. Baffou, "*Thermoplasmonics* "Cambridge University Press, (۲۰۱۷).

[۲] G. Baffou, & R. Quidant "Nanoplasmonics for chemistry". *Chemical Society Reviews*, ٤٣(١١), (٢٠١٤). ٣٨٩٨-٣٩٠٧.

[۳] P. K. Jain," Calculated absorption and scattering properties of gold nanoparticles of different size, shape, and composition: applications in biological imaging and biomedicine." *J. Phys. Chem. B*, ١١٠, (٢٠٠٦) ٧٢٣٨-٤٨.

[٤] G.Baffou, & R. Quidant, "Thermo-plasmonics: using metallic nanostructures as nano-sources of heat." *Laser & Photonics Reviews*, ٧(٢), (٢٠١٣) ١٧١-١٨٧.

[٥] P. D. Dongare, Y. Zhao, D. Renard, J. Yang, O.Neumann, J. Metz, ... & N. J. Halas, "A ٣D Plasmonic Antenna-Reactor for Nanoscale Thermal Hotspots and Gradients". *ACS nano*, *15*(٥), (٢٠٢١) ٨٧٦١-٨٧٦٩.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تاثیر مورفولوژی نانوذرات بر خواص ترموپلاسمونیک نانوفریم‌های دایمرشش گوشی

نوری کوهانی، فهیمه[۱]؛ آذریان، عباس[۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه قم ، انتهای بلوار محمد امین ، قم

چکیده

ترموپلاسمونیک که یک علم نوظهور است به گرمای ناشی از تشدید پلاسمونیک سطحی موضعی نانوذرات فلزی می پردازد و اخیراً کاربردهای آن در زمینه هایی مانند فیزیک، شیمی، پزشکی و ... مورد توجه قرار گرفته است. نانوذرات به عنوان منابع گرمایی عمل می کنند که از راه دور توسط نور کنترل می شوند. این تغییرات حرارتی باعث افزایش دما در نانو ذرات و محیط می شود. اندازه گیری گرمای تولید شده اساساً پیچیده است. در این مقاله تأثیر شکل یا مورفولوژی نانوذرات شش ضلعی، هشت ضلعی، ۱۲ وجهی و دایره ای بر افزایش میدان الکتریکی نسبی و گرمای تولید شده شبیه سازی شده است.

واژه های کلیدی: *پلاسمونیک، تشدید پلاسمون سطحی، خواص ترموپلاسمونیک، نانوذرات دوتایی، نانوذرات شش گوشی،شکل نانوذرات، ریخت‌شناسی .*

The effect of nanoparticles morphology on thermoplasmonic properties of polygonal dimer nanoframes

Noori Kohani, Fahimeh[1]; Azarian, Abass[1]

[1] *Department of Physics, University of Qom, Qom*

Abstract

Thermoplasmonics, which is an emerging science, deals with the heat caused by the local surface plasmonic resonance of metal nanoparticles, and recently its applications in fields such as physics, chemistry, medicine, etc. have been considered. Nanoparticles act as heat sources remotely controlled by light. These thermal changes increase the temperature in the nanoparticles and the environment. Measuring the heat generated is fundamentally complicated. The article has been invistigated and simulated the effect of the shape or morphology of nanoparticles, hexagonal, octagonal, 12-sided, and circular the increase of the relative electric field and the generated heat.

***Keywords**: Plasmonic, Thermoplasmonics, Dimer nanoparticles, Hexagonal nanoparticles, Morphology.*

PACS No. 81

مقدمه

علم پلاسمونیک در نانوذرات فلزی در سال‌های اخیر به دلیل خاصیت‌های اپتیکی و گرمایی مورد توجه قرار گرفته‌است. هنگامی که سطح یک نانوذره فلزی در معرض تابش نور قرار می‌گیرد، الکترون‌های رسانش در سطح آن به صورت جمعی شروع به نوسان می‌کنند، که به کوانتوم این نوسانات چگالی بار، پلاسمون و به این نوسانات غیر انتشاری، پلاسمون سطحی جایگزیده[۱] (LSP) گفته می‌شود[۱].

نانوذرات به کمک جذب نور تابیده شده به آنها می‌توانند گرمایی در ابعاد نانو تولید کنند[۲]. تولید گرما توسط نانوذرات دارای کاربردهای است از جمله می‌توان از کاربردهای آن در فیزیک[۳]، شیمی[٤]، زیست‌شناسی و پزشکی[٥] مثال زد. لازم

[1] Localized Surface Plasmon

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

به ذکر است که این فرآیند تنها به تولید گرما ختم نمی‌شود، بلکه شامل انتقال گرما از نانوذرات به محیط اطراف نیز هست[٦].

نانوذرات با اشکال[2] گوناگون دارای کاربردهای متفاوت فیزیکی، شیمیایی یا بیولوژیکی هستند زیرا توانایی تولید گرما در آنها به شدت به شکل آنها وابسته است [٦]. به این علت در این مقاله به بررسی تاثیر شکل یا ریخت‌شناسی نانوذرات در تغییرات دما که تولید می‌کنند و گرمایی که به وجود می‌آورند، پرداخته شده است.

مبانی نظری

زمانی که نانوذرات فلزی در معرض میدان الکترومغناطیسی قرار می‌گیرند، بارهای آزاد نانوذرات با فرکانس میدان الکتریکی تابانده شده، نوسان می‌کنند. مقدار نور جذب شده توسط نانوذرات به سطح مقطع جذب(σ_{abs}) آن‌ها وابسته است که با رابطه زیر بیان می‌شود[٨]:

$$\sigma_{abs} = \frac{k}{\varepsilon_0 |E_0|^2} \int Im(\varepsilon_\omega) |E(r)|^2 dr \qquad (1)$$

در این رابطه $k=n\omega/c$ بردار موج، n ضریب شکست محیط اطراف، ε_ω تابع دی‌الکتریک ماده نانوذره، E_0 دامنه میدان الکتریکی نور فرودی و E(r) میدان الکتریکی کل است. ضمن آنکه انتگرال بر روی حجم نانوذره گرفته می شود.

نوسانات الکتریکی ناشی از تابش نور فرودی که شبیه جریان الکتریکی در یک فلز است، باعث اتلاف انرژی می‌شود و به اثر گرمایش ژول معروف است[٩] همچنین با مجذور میدان الکتریکی فرودی و تابع دی‌الکتریک نانوذره رابطه‌ای مستقیم دارد:

$$q(r) = \frac{\omega}{2} \varepsilon_0 Im(\varepsilon) |E(r)|^2 \qquad (2)$$

از سوی دیگر گرما در حجم مورد نظر را می‌توان به‌صورت تابعی از سطح مقطع جذب بیان کرد :

$$Q(r) = \sigma_{abs} I \qquad (3)$$

که در این رابطه $I=nc\varepsilon_0 E_0^2/2$ شدت تابش موج فرودی است[١٠].

نانوذرات در محیطی با رسانندگی گرمایی κ، چگالی ρ و ظرفیت گرمایی ویژه در فشار ثابت c_p تغییرات دمایی یا گرادیان دما ایجاد می‌کنند، به کمک گرمایش ژول، چگالی توان گرمایی در نانوذرات فلزی در هر زمان t و هر مکان r به صورت زیر خواهد بود[١]:

$$\rho c_P \delta_t T - \kappa \nabla^2 T = q \qquad (4)$$

می‌توان این معادله را برای نانوذرات مختلف با اشکال متفاوت از جمله نانوفریم دایمر بررسی شده در این پژوهش، حل کرد و معادله توزیع دما در اطراف نانوذرات را به دست آورد[١١].

نتایج

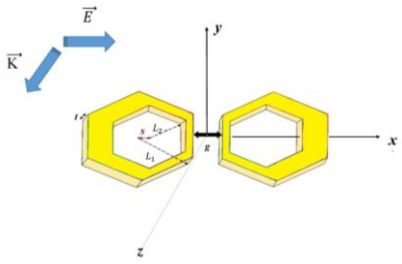
در این مقاله سطح مقطع جذب نانوذرات به روش المان محدود در حوزه زمان(FDTD) محاسبه شده و سپس توزیع دما بر روی سطوح و محیط اطراف نانوذرات در طول موج (785 nm) لیزر طیف سنجی رامان که لیزری پر کاربرد و ابزاری محبوب برای تحقیقات علمی، توسعه صنعتی و کنترل فرآیند در طیف گسترده‌ای از کاربردهای شیمیایی، دارویی و زیست پزشکی است، محاسبه گردیده است.

در فلزات نجیب مانند طلا، طول موج تشدید پلاسمون سطحی در محدوده مرئی و مادون قرمز نزدیک طیف الکترومغناطیس واقع می‌شود. در این شبیه‌سازی از شدت $I=1\ kW/m^2$ استفاده شده است. ضمن آنکه نانوذرات از جنس طلا و بر روی زیرلایه‌ای از جنس آلومینا و در محیط هوا در نظر گرفته شده‌اند.

نانوذرات شبیه‌سازی شده به صورت دوتایی (دایمر) و متشکل از دو نانوذره شش ضلعی با ضخامت $t=12\ nm$ و شعاع محاطی $L_1=60\ nm$ هستند. از طرفی نانوذرات دارای حفره‌ای با شعاع محاطی $L_2=40\ nm$ می‌باشند و آنها را تبدیل به نانوفریم کرده است. فاصله مرکز حفره از مرکز نانوذره $s=18\ nm$ و فاصله نانوذرات از هم(گپ) $g=4\ nm$ است. همچنین قطبش میدان الکتریکی در جهت محور x ها مطابق با شکل١. در نظر گرفته شده است.

[2] morphology

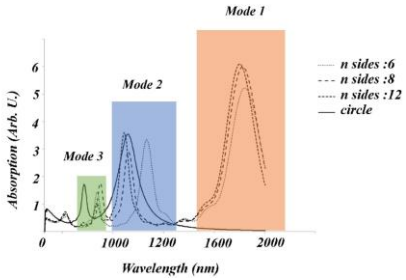
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



شکل ۱ : تصویر شماتیک پارامترهای هندسی نانوذرات شبیه‌سازی شده، جهت تابش و قطبش نور فرودی.

یکی از پارامترهایی که با تغییر آن باعث تغییر میدان و دما نانوذرات می‌شود شکل دایمر یعنی تغییر در گوشه‌ها و لبه‌های نانوذرات است و در این پروژه به بررسی این مورد پرداخته شده است. به این منظور به شبیه‌سازی و نهایتا مقایسه نانوفریم‌های ٦ ضلعی و ٨ ضلعی و ١٢ ضلعی و دایروی پرداخته شده است. مقالات مختلف به نحوه ساخت نانوذرات چند ضلعی یا چند وجهی با روش‌های گوناگون[١٢و١٣] از جمله لیتوگرافی [١٤] و رویکرد خود مونتاژی [١٥] و ... پرداخته‌اند و هدف در این پژوهش، بررسی اثر گوشه‌های تیز و لبه‌های باریک در مورفولوژی نانوذرات هنگام تولید گرما و تغییرات دما است.

شکل ٢ سطح مقطع جذب نانوفریم‌های ٦، ٨، ١٢ ضلعی و دایره را نمایش می‌دهد. نانوفریم‌های ٦، ٨، ١٢ ضلعی دارای سه مد هستند ولی نانوفریم دایروی دو مد یا دو پیک بروز می‌دهد. در مد اول شیفت بارزی در پیک نانوفریم‌های ٦، ٨، ١٢ ضلعی، مشاهده نمی‌شود فقط ارتفاق قله شش ضلعی کوتاه‌تر از بقیه است و اما مد اول نانوفریم دایروی در محدوده طول موج مدهای دوم نانوفریم‌های گوشه‌دار (٦، ٨، ١٢ ضلعی) قرار گرفته است. در مد دوم قله‌های ٨ و ١٢ ضلعی و مد اول دایروی نسبت به شش ضلعی بلو شیفت دارند و نکته جالبی که وجود دارد ارتفاع قله ١٢ ضلعی و دایره تقریبا برابر است که نشان دهنده مقدار جذب نور یکسانی در هر دو است، و قله شش ضلعی کوتاه‌تر و نهایتا قله ٨ ضلعی نسبت به بقیه کوتاه‌ترین است. رفتار قله‌ها در مد سوم کاملا متفاوت است مد دوم دایروی نیز در محدوده مدهای سوم بقیه نانوفریم‌ها قرار دارد و شاهد این هستیم که مد دوم دایروی نسب به بقیه بلوشیف شدیدی دارد و نکته جالب این است که ارتفاع قله مد سوم ٦ ضلعی از بقیه خیلی کوتاه‌تر است که این نشان دهنده میزان کم جذب در این طول موج می‌باشد.



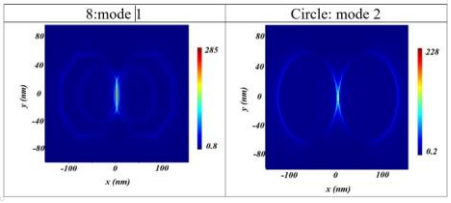
شکل٢ : سطح مقطع جذب نانوذرات به ازای اشکال مختلف نانوذرات (٦ ضلعی – ٨ ضلعی – ١٢ ضلعی – دایروی)

در جدول ١ بیشینه نسبت میدان الکتریکی موضعی به میدان الکتریکی نور فرودی برای مدهای اول، دوم و سوم ٦ ضلعی و دایروی آورده شده است. همان‌گونه که در جدول ذکر شده میدان در نانوفریم دایروی به مقدار قابل توجهی نسبت به ٦ ضلعی افزایش پیدا کرده است.

جدول ١ بیشینه نسبت میدان الکتریکی موضعی به میدان الکتریکی نور فرودی برای مدهای اول، دوم و سوم ٦ ضلعی و دایروی

N sides	E_1	E_2	E_3
6	149	113	47
circle	-	228	148

شکل ٣ نقشه تغییرات میدان اطراف نانوذرات در حالت 8 ضلعی در مد اول و دایروی در مد اول را نمایش می‌دهد و در دو حالت بیشینه میدان بین دونانوذره اتفاق می افتد.



شکل٣ نقشه تغییرات میدان اطراف نانوذرات در حالت ٨ ضلعی و دایروی

جدول ٣ بیشترین تغییر دما نسبت به محیط اطراف ذرات (٣٠٠ درجه کلوین) را برای نانوفرم‌های مختلف که شبیه‌سازی شده است در طول موج ٧٨٥ نانومتر را نمایش می‌دهد. همان‌طور که مشخص است بیشترین تغییر دما برای ٦ ضلعی ($\Delta T = 49°C$) است چون دارای گوشه‌ها و لبه‌های تیزتری نسبت به فریم‌های دیگر است و این نقاط نک تیز باعث افزایش دما خواهند شد. در حالت ٦ ضلعی به علت وجود ضلع‌ها و گوشه‌ها و لبه‌های تیز خود نانوذره و حفره درون آن و همچنین عدم تقارن در نانوفریم‌ها در

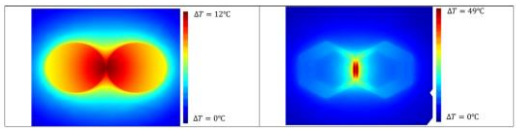
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

حالت قرار گرفتن حفره‌ها در داخل نانوفریم‌ها شاهد دمای بالایی هستیم و هرچه شکل نانوفریم‌ها به طرف گردتر شدن گوشه‌ها تمایل پیدا کرده است از شدت تغییرات دما کاسته شده تا در نانوفریم دایروی دما نسبت به نانوفریم‌های گوشه‌دار به شدت کاهش پیدا کرده است، کمترین دما مربوط به نانوفریم دایروی ($\Delta T = 12°C$) است که فریمی کاملا بدون لبه و گوشه است.

جدول ۳ تغییرات دما نانوفریم‌های ٦ ضلعی، ۸ ضلعی، ۱۲ ضلعی و دایروی در طول موج ۷۸۵ نانومتر

N sides	ΔT (°C)
6	**49**
8	**48**
12	**47**
circle	**12**

شکل ٤ نقشه تغییرات دما اطراف و داخل نانوفریم‌ها را نمایش می‌دهد. در نانوفریم ٦ ضلعی دما در فاصله بین نانوفریم‌ها (در گپ) به شدت افزایش یافته و در کل توزیع دما کاملا غیر یکنواخت است در حالی که در نانوفریم دایروی دما به‌طور یکنواخت تقریبا در نانوفریمها توزیع شده است اما هنوز دما بین نانوفریم‌ها بیشتر است (ناحیه قرمز رنگ تیره). از این تفاوت در توزیع دما نانوفریم‌ها می‌توان در کاربردهای متفاوت زمانی‌که توزیع دمای موضعی در نظر است یا توزیعی یکنواخت‌تر استفاده کرد.



شکل ٤ : نقشه دما نانوفریم ٦ ضلعی و دایروی

نتیجه‌گیری

تاثیر تغییر شکل نانوفریم‌ها از ٦ ضلعی تا دایروی (٦ ضلعی، ۸ ضلعی، ۱۲ ضلعی و دایروی) بر روی دمای موضعی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج بیانگر آن است که تغییر شکل نانوفریم‌ها و همچنین عدم تقارن به وجود آمده در شکل آنها به شدت بر دمای موضعی و نحوه توزیع آن تاثیر می گذارد که امکان استفاده از نانوفریم‌های نامتقارن را در حوزه‌های علوم مختلف فراهم می‌سازد.

مرجع‌ها

[1] G. Baffou, “*Thermoplasmonics* “Cambridge University Press, (2017).

[2] F. Cichos, G. Baffou, R. Quidant; "Applications and challenges of thermoplasmonics." *Nature Materials* **19**, No. 9 (2020) 946-958.

[3] T. Brick, "Hot-carriers and losses in plasmonic nanostructures." (2019).

[4] S. Linic, P. Christopher, & D. B. Ingram, “Plasmonic-metal nanostructures for efficient conversion of solar to chemical energy.” *Nature materials*, 10(12), (2011) 911-921.

[5] J.M. Stern, J.Stanfield, W.Kabbani, J.T. Hsieh, and J.A. Cadeddu. "Selective prostate cancer thermal ablation with laser activated gold nanoshells." *The Journal of urology* **179**, No. 2 (2008): 748-753.

[6] G. Baffou, & R. Quidant “Nanoplasmonics for chemistry”. *Chemical Society Reviews*, 43(11), (2014). 3898-3907.

[7] G. Baffou, R. Quidant, & C. Girard, “Heat generation in plasmonic nanostructures: Influence of morphology. “ *Applied Physics Letters*, 94(15), (2009) 153109.

[8] P. K. Jain," Calculated absorption and scattering properties of gold nanoparticles of different size, shape, and composition: applications in biological imaging and biomedicine." *J. Phys. Chem. B*, **110**, (2006) 7238-48.

[9] G.Baffou, & R. Quidant, “Thermo-plasmonics: using metallic nanostructures as nano-sources of heat.” *Laser & Photonics Reviews*, 7(2), (2013) 171-187.

[10] L. K. Khorashad, L. V. Besteiro, Z. Wang, J. Valentine, & A. O. Govorov, “Localization of temperature using plasmonic hot spots in 117 metal nanostructures: The Nano-optical antenna approach and Fano effect”. arXiv preprint arXiv, (2016) 1604.03585.

[11] P. D. Dongare, Y. Zhao, D. Renard, J. Yang, O.Neumann, J. Metz, ... & N. J. Halas, “A 3D Plasmonic Antenna-Reactor for Nanoscale Thermal Hotspots and Gradients”. *ACS nano*, *15*(5), (2021) 8761-8769.

[12] Ma, Y., Kuang, Q., Jiang, Z., Xie, Z., Huang, R., & Zheng, L. (2008). Synthesis of Trisoctahedral Gold Nanocrystals with Exposed High-Index Facets by a Facile Chemical Method. Angewandte Chemie International Edition, 47(46), 8901-8904.

[13] Carbó-Argibay, E., Rodríguez-González, B., Pacifico, J., Pastoriza-Santos, I., Pérez-Juste, J., & Liz-Marzán, L. M. (2007). Chemical sharpening of gold nanorods: the rod-to-octahedron transition. Angewandte Chemie International Edition, 46(47), 8983-8987

[14] Chen, D., Zhou, J., Rippa, M., & Petti, L. (2015). Structure-dependent LSPR characteristics and SERS performances of quasi-periodic nano-arrays: measurements and analysis. J. Appl. Phys, 118, 163101.

[15] Zhang, Y. X., Hao, X. D., Kuang, M., & De Chen, R. (2013). Interfacial polygonal patterning via surfactant-mediated self-assembly of gold nanoparticles. Nanoscale research letters, 8(1), 1-7.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

به روز رسانی تحلیل QCD در تعیین توابع توزیع قطبیده‌ی پارتونی و تابع ساختار قطبیده‌ی عرضی

اربابی فر ،فاطمه [۱] ؛ آتشبار تهرانی ،شاهین [۲]

[۱] گروه فیزیک، پردیس نسیبه، دانشگاه فرهنگیان ، تهران

[۲] پژوهشگاه دانش های بنیادی، پژوهشکده ذرات و شتاب گر ها ، تهران

چکیده

در این مقاله توابع توزیع قطبیده‌ی پارتونی و تابع ساختار قطبیده‌ی عرضی با استفاده از تحلیل QCD به روز شده روی داده‌های DIS و SIDIS قطبیده مورد بررسی قرار می‌گیرند. در این آنالیز آخرین داده‌های تجربی Compass16 و JLAB17 به داده‌های تجربی تحلیل اخیر AKS14 افزوده شده و با انتخاب فرم پارامتری برای توابع توزیع پارتون‌ها در مقیاس اولیه Q_0^2 و شکست تقارن توزیع کوارک‌های سبک دریا، پارامترهای مجهول از فرآیند برازش استخراج می‌شوند. در ادامه ضمن بررسی اثر داده‌های جدید روی نتایج آنالیز، تابع ساختار قطبیده عرضی g_2 به طور خاص استخراج شده و با نتایج حاصل از آنالیز با شکست تقارن قبلی AKS14 و آنالیز بدون شکست تقارن NAAMY21 مقایسه می‌شود. در نهایت به نظر می‌رسد که افزایش داده های تجربی و لحاظ کردن شکست تقارن کوارک‌های دریا سبب تغییراتی در توابع توزیع پارتونی قطبیده و توافق بهتر تابع g_2 با داده‌های تجربی شده است.

واژه های کلیدی: *شکست تقارن، تحلیل QCD، تابع عدم تقارن، تابع ساختار قطبیده.*

An update of QCD analysis to determine polarized parton distributions and transverse polarized structure function

Arbabifar, Fatemeh[1]; Atashbar Tehrani, Shahin[2]

[1] Department of Physics, Nasibeh campus, University of Farhangian, Tehran
[2] School of Particles and Accelerators, Institute for Research in Fundamental Sciences (IPM)

Abstract

In this article, an update analysis on DIS and SIDIS data is performed and the effect of symmetry breaking of light sea quarks on the polarized parton distribution functions and transverse polarized structure function is studied. Here we employ the latest experimental data from 1jlab17 and COMPASS16 in addition to the data used in AKS14 analysis. We extract unknown parameters from a QCD fit on experimental data. After studying the results of parton distribution functions, we concentrate on the transverse polarized structure function g_2. Finally it seems that the results of new analysis causes some changes on the distributions and it is more consistent with experimental data in comparison to other models.

***Keywords**: Symmetry breaking, QCD analysis, Asymmetry, Polarize structure function*

PACS No. ۱۳

مقدمه

یکی از اهداف مهم تحلیل‌های QCD، شناخت دقیق ساختار اسپینی نوکلئون و بررسی سهم پارتون‌ها از اسپین آنها بوده که با توجه به گسترش آزمایش‌ها در زمینه‌ی برخورد لپتون‌ها با نوکلئون‌های قطبیده، این تحلیل‌ها نسل به نسل دقیق‌تر می‌شوند. در تحلیل اخیر گروه AKS14 [۱] در سال ۲۰۱٤ از داده‌های عدم تقارن A_1 ناشی از پراکندگی ناکشسان قطبیده‌ی فراگیر DIS (Deep Inelastic scattering) و نیمه فراگیر SIDIS (Semi

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

Inclusive DIS) از گروه‌های تجربی DESY، SLAC ،CERN و JLAB که در مرجع [۱] معرفی شده‌اند استفاده شد و اثر شکست تقارن توزیع کوارک‌های دریای سبک $\overline{\delta u} \neq \overline{\delta d} \neq \overline{\delta s}$ روی توابع توزیع پارتونی قطبیده مورد بررسی قرار گرفت. آزمایشات DIS فراگیر در تعیین جمع توزیع کوارک‌ها و آنتی کوارک‌ها مفید هستند و داده‌های SIDIS اطلاعات خوبی در مورد تفاوت کوراک‌ها و آنتی کوارک‌ها ارائه می‌دهند و استفاده از هر دو گروه داده‌ها در بررسی اثر شکست تقارن بسیار مهم و تعیین‌کننده است. نتایج سایر گروه‌های نظری نیز که شکست تقارن را در آنالیزشان لحاظ کرده‌اند در مرجع های [۲و۳] آمده است .

در مقاله حاضر علاوه بر داده‌های استفاده شده در آنالیز AKS14، داده‌های اخیر A_1 پروتون از گروه تجربی COMPASS16 [٤]، داده های A_1 دوترون از گروه تجربی COMPASS17 [٥] و همچنین داده های A_1 پروتون از گروه تجربی JLAB17 [٦] نیز به آنالیز اضافه شده است. تعداد کل داده های آزمایشگاهی استفاده شده در این تحلیل برابر ۱۲٤٦ است. اثر این به روز رسانی روی توابع توزیع پارتونی و تابع ساختار قطبیده‌ی عرضی به طور خاص بررسی خواهد شد.

چارچوب نظری

تابع ساختار قطبیده در فرآیند پراکندگی ناکشسان ژرف قطبیده فراگیر DIS به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$g_1(x,Q^2)=\frac{1}{2}\sum_{q,\bar{q}}^{n_f}e_q^2\left\{\left[1+\frac{\alpha_s}{2\pi}\delta c_q\right]\otimes\delta q(x,Q^2)+\frac{\alpha_s}{2\pi}2\delta c_g\otimes\delta g(x,Q^2)\right\}, \quad (۱)$$

که در اینجا α_s ثابت جفت‌شدگی در مرتبه NLO و $\delta q(x,Q^2)$، $\delta g(x,Q^2)$ و $\delta c_{q,g}$ توابع توزیع پارتون‌های قطبیده و ضرایب ویلسون تصحیحی هستند [۱].تابع ساختار قطبیده در فرآیند پراکندگی ناکشسان ژرف قطبیده نیمه فراگیر SIDIS به صورت

$$g_{1N}^h(x,z,Q^2)=\frac{1}{2}\sum_{q,\bar{q}}^{n_f}e_q^2\left\{\left[\delta q\left(1+\otimes\frac{\alpha_s(Q^2)}{2\pi}\delta c_{qq}\otimes\right)D_q^h+\delta q\otimes\frac{\alpha_s(Q^2)}{2\pi}\delta c_{gq}^{(1)}\otimes D_g^h+\delta g\otimes\frac{\alpha_s(Q^2)}{2\pi}\delta c_{qg}^{(1)}\otimes D_q^h\right](x,z,Q^2)\right\}. \quad (۲)$$

برحسب توابع توزیع پارتون‌های قطبیده، ضرایب ویلسون و توابع ترکش $D_{q,g}^h$ تعریف می‌شوند [۷].

رابطه‌ی

$$F_1(x,Q^2)=\frac{(1+\gamma^2)}{2x(1+R(x,Q^2))}F_2(x,Q^2), \quad (۳)$$

همان تابع ساختار غیرقطبیده است که برحسب متغیر جنبشی γ ، R و تابع ساختار $F_2(x,Q^2)$ تعیین می‌شود. در این محاسبات ما از تابع ساختار تجربی ارائه شده در مرجع [۸] استفاده کرده و تعاریف متغیرهای جنبشی نیز در مرجع [۱] آمده است.

همچنین تابع ساختار غیر قطبیده در فرآیند SIDIS از این قرار است:

$$F_{1N}^h(x,z,Q^2)=\frac{1}{2}\sum_{q,\bar{q}}^{n_f}e_q^2\left\{\left[q\left(1+\otimes\frac{\alpha_s(Q^2)}{2\pi}\otimes c_{qq}\right)D_q^h+q\otimes\frac{\alpha_s(Q^2)}{2\pi}c_{gq}^{(1)}\otimes D_g^h+g\otimes\frac{\alpha_s(Q^2)}{2\pi}c_{qg}^{(1)}\otimes D_q^h\right](x,z,Q^2)\right\}, \quad (٤)$$

که q، g، $D_{q.g}^h$ و $c_{q(\ g)\ g(\ q}$ به ترتیب توابع توزیع پارتونی غیرقطبیده، توابع ترکش و ضرایب ویلسون هستند [۱]. در تحلیل پیش رو از یکی از دقیق‌ترین توابع توزیع پارتونی غیرقطبیده موجود از گروه MRST02 [۹] استفاده شده و برای توابع توزیع ترکش هم از کد DSS [۷] استفاده شده است.

در نهایت با مشخص شدن توابع ساختار قطبیده و غیر قطبیده می‌توان توابع عدم تقارن A_1 (Asymmetry) و A_{1N}^h را در فرآیندهای DIS و SIDIS به ترتیب زیر معرفی کرد و برازش را روی داده‌های تجربی این دو انجام داد

$$A_1(x,Q^2)=\frac{g_1(x,Q^2)}{F_1(x,Q^2)}, \quad (٥)$$

$$A_{1N}^h(x,z,Q^2)=\frac{g_{1N}^h(x,z,Q^2)}{F_{1N}^h(x,z,Q^2)}. \quad (٦)$$

تابع ساختار قطبیده‌ی $g_2(x,Q^2)$ نیز که نشاندهنده‌ی اسپین عرضی حمل شده توسط نوکلئون‌هاست با رابطه‌ی واندزورا-ویلسزک که در مرجع [۱۰] معرفی شده است تعریف می‌شود

$$g_2(x,Q^2)=-g_1^p(x,Q^2)+\int_x^1\frac{dy}{y}g_1^p(y,Q^2). \quad (۷)$$

پارامتربندی توابع توزیع پارتونی قطبیده و برازش

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

فرم پارامتری که به هر کدام از پارتون‌ها در مقیاس ورودی $Q^2_0 = 1GeV^2$ اختصاص داده از قرار زیر است

$$x\delta q = N_q \eta_q x^{a_q}(1-x)^{b_q}(1+c_q x^{0.5}+d_q x), \qquad (۸)$$

که در این رابطه $\delta q = \delta u + \delta\bar{u}, \delta d + \delta\bar{d}, \delta\bar{u}, \delta\bar{d}, \delta\bar{s}, \delta g$ و N_q ضریب بهنجارش بوده که به این صورت تعریف می‌شود:

$$\frac{1}{N_q} = \left(1 + d_q \frac{a_q}{a_q + b_q + 1}\right) B(a_q, b_q + 1) \qquad (۹)$$
$$+ c_q B\left(a_q + \frac{1}{2}, b_q + 1\right),$$

در رابطه (۸) پارامتر η_q اولین مومنت تابع توزیع پارتونی مربوطه بوده و در رابطه (۹) تابع B(a,b) تابع اویلر-بتا است . در محاسبات حاضر $\delta s(x,Q^2) = \delta\bar{s}(x,Q^2)$ در نظر گرفته شده و برای کنترل رفتار توزیع $\delta\bar{u}$ و $\delta\bar{d}$ در x های کوچک $a_{u+\bar{u}} = a_{\bar{u}}$ و همینطور $a_{d+\bar{d}} = a_{\bar{d}} = a_s$ انتخاب شده‌اند. همچنین مقادیر $\eta_{d+\bar{d}}$ و $\eta_{u+\bar{u}}$ که اولین ممنت توابع توزیع $\delta u + \delta\bar{u}$ و $\delta d + \delta\bar{d}$ هستند از رابطه زیر بدست می آید:

$$\Delta u + \Delta\bar{u} = 0.9275 + \Delta s + \Delta\bar{s}, \qquad (۱۰)$$
$$\Delta d + \Delta\bar{d} = -0.3415 + \Delta s + \Delta\bar{s}.$$

شایان ذکر است که در این محاسبات تقارن ایزواسپین برای پروتون و نوترون در نظر گرفته شده است، بگونه ای که:

$$\delta u^p = \delta d^n \quad \delta\bar{u}^p = \delta\bar{d}^n \quad \delta d^p = \delta u^n, \qquad (۱۱)$$
$$\delta\bar{d}^p = \delta\bar{u}^n \quad \delta s^p = \delta s^n \quad \delta\bar{s}^p = \delta\bar{s}^n.$$

با استفاده از معادلات تحول [۱۱] برای یافتن توابع عدم تقارن در انرژی ارائه شده توسط گروه‌های تجربی می‌توان عملیات برازش را انجام داده و تابع توزیع پارتونی قطبیده را استخراج کرد. برای بدست آوردن بهترین نتیجه و محاسبات خطا از رابطه زیر برای تعیین χ^2 مؤثر استفاده می‌کنیم

$$\chi^2_{global} = \sum_n \omega_n \chi^2_n \qquad (۱۲)$$
$$\chi^2_n = \left(\frac{1-N_n}{\Delta N_n}\right)^2 + \sum_i \left(\frac{N_n A^{data}_{1,i} - A^{theor}_{1,i}}{N_n \Delta A^{data}_{1,i}}\right),$$

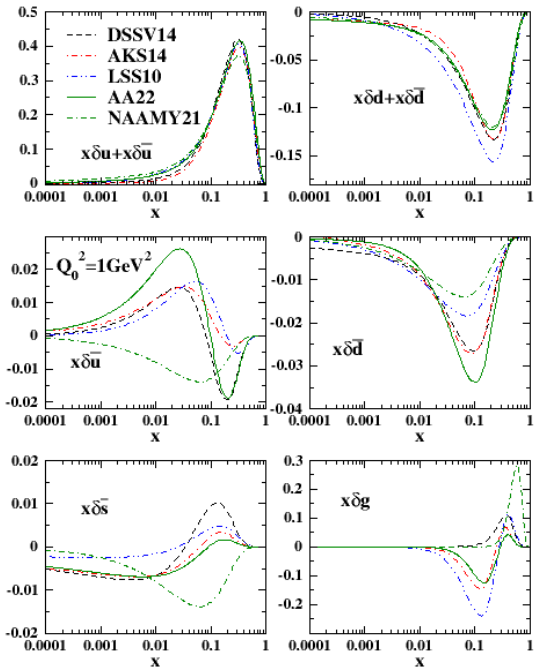
برای انجام فرآیند برازش از برنامه MINUIT استفاده می‌کنیم و در نهایت مجهولات توابع توزیع و در نهایت فرم پارامتری آنها تعیین می‌گردد[۱]. در این محاسبات مقدار $\chi^2 / d.o.f = 1.05$ بدست آمده است که برای ۱۲۲۹ درجه آزادی تعریف شده است و بیانگر موردقبول بودن فرآیند برازش انجام گرفته است. در جدول ۱ مقادیر عددی پارامترهای به دست آمده از آنالیز حاضر نمایش داده شده است.

بررسی نتایج

همانطور که ملاحظه شد در تحقیق حاضر توابع توزیع پارتون‌های قطبیده با اعمال شکست تقارن توزیع کوارک‌های سبک دریا و با اضافه کردن داده‌های جدید به تحلیل اخیر AKS14 محاسبه شد.

جدول ۱ : مقادیر عددی پارامترهای مجهول حاصل از برازش.

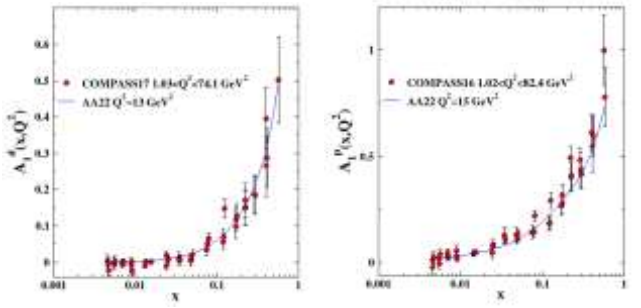
	$u+\bar{u}$	$d+\bar{d}$	$\bar{u}$
a	۰/۴۶۶±۰/۰۱۶	۰/۱۳۲±۰/۰۰۴	۰/۴۶۶±۰/۰۱۶
b	۲/۷۰۸±۰/۰۵۴	۴/۰۵۸±۰/۱۷۴	۱۰/۰
c	۰	۰	۱۴/۳۲۴±۶/۱۰
d	۳۵/۶۵±۴۶/۱۲۹	۶۶/۱۲۷±۲/۰۲۷	-۵۵/۵۶±۵/۶۹۱
η	۰/۸۵۷۶	-۰/۴۱۱۳	۰/۰۶۵۲±۰/۰۰۳
	$\bar{d}$	$\bar{s}$	g
a	۰/۱۳۲±۰/۰۰۴	۰/۱۳۲±۰/۰۰۴	۲/۷۸۱±۰/۰۰۷
b	۱۰/۰	۱۰/۰	۱۰/۰
c	۹/۱۵۴±۱/۹۳۸	۰	۰
d	۹۹۸/۴۷±۶۴۴/۳۹۰	-۱۱/۰۱۳±۰/۰۰۷	-۳/۳۸۰±۰/۳۷۹
η	-۰/۰۸۸±۰/۰۰۲	-۰/۱۳۹±۰/۰۰۳	-۰/۱۳۶±۰/۰۰۷



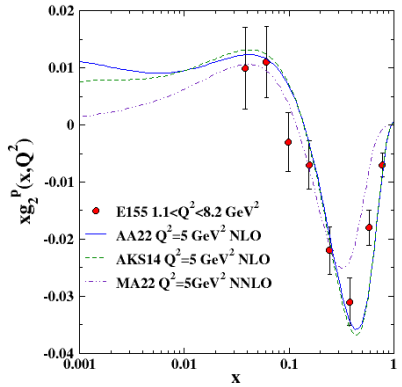
شکل ۱. توابع توزیع قطبیده‌ی پارتونی ناشی از مدل حاضر(AA22) در مقایسه با مدل‌های دارای شکست تقارن AKS14، LSS10 و DSSV14 و مدل بدون شکست تقارن NAAMY.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

در شکل۱ توابع توزیع قطبیده تحلیل حاضر (AA2) با نتایج بدست آمده از تحلیل اخیر AKS14 و نتایج ارائه شده توسط گروه‌های DSSV14 [۲] و LSS10 [۳] که از شکست تقارن استفاده کرده‌اند مقایسه شده است. همچنین نتایج حاصل از یک آنالیز جدید از گروه NAAMY21 [۱۲] که تنها از داده‌های DIS استفاده کرده و شکست تقارن در آن لحاظ نشده است نیز در این شکل نشان داده شده است. همانطور که مشهود است در نتایج آنالیز حاضر سهم پارتون‌های $\bar{u}$ و $\bar{d}$ از اسپین پروتون به ترتیب مثبت و منفی شده که نسبت به حالت تقارن (هر دو منفی) دقیق‌تر شده است. همچنین در نتایج آنالیز حاضر این سهم ها بیشتر از آنالیز AKS14 است که این افزایش تحت تاثیر داده های جدید از گروه COMPASS [٤و٥] و JLAB [٦] رخ داده است. همچنین توزیع پارتون $s=\bar{s}$ و گلوئون نیز دارای یک تغییر علامت حوالی $x=0.1$ و $x=0.2$ شده اند که در حالت دارای تقارن مشاهده نمی‌شود. همچنین مشاهده می‌شود که تحت تأثیر داده‌های آزمایشگاهی جدید سهم اسپینی این دو پارتون در آنالیز حاضر از آنالیز AKS14 کمتر شده است. در شکل ۲ توابع عدم تقارن پروتون و دوترون حاصل از آنالیز حاضر نمایش داده شده و با داده‌های تجربی گروه COMPASS [٤و٥] مقایسه شده است. همانطور که مشاهده می‌شود نتایج حاصل تطابق خوبی با داده‌های تجربی اخیر دارند. در نهایت شکل ۳ مقایسه تابع توزیع قطبیده عرضی $g_2(x,Q^2)$ از تحلیل حاضر و تحلیل AKS14 و تحلیل جدید بدون شکست تقارن در مرتبه‌ی NNLO از آنالیز اخیر MA22 [۱۳] را نمایش داده و در مقایسه با داده‌های تجربی قرار داده است. افزایش دقت تا مرتبه‌ی NNLO در محاسبات MA22 در واقع در نظر گرفتن توان‌های بالاتر ضرایب جفت شدگی در محاسبات است که حلقه‌های بیشتری از زیربرهم کنش‌ها را در بر می‌گیرد. در آنالیز حاضر به دلیل پیچیدگی محاسبات ضرایب ویلسون در فضای x و z فعلا امکان ورود به تقریب‌های مرتبه‌ی بالاتر از NLO نیست. در این شکل تعداد نقاط گذرنده از منحنی دو مدل AA22 و AKS14 برابر ٦ نقطه و تعداد نقاط تجربی گذرنده از منحنی مدلMA22 برابر ٤ نقطه است. همانطور که ملاحظه می‌شود تأثیر داده های SIDIS در افزایش دقت تطابق منحنی با داده‌های تجربی مخصوصا در نواحی $x>0.2$ دیده می‌شود. شایان ذکر است که مقدار پارامتر آماری χ^2 برای آنالیز MA22 برابر ۱,۱٦ و برای آنالیز حاضر ۱,۰۳ است که تأیید کننده‌ی تطابق بهتر داده‌های تجربی و مدل در آنالیز حاضر است.



شکل۲. مقایسه A_1 پروتون و دوترون حاصل از آنالیز حاضر (AA2) با داده های تجربی COMPASS.



شکل ۳ : تابع xg_2^p حاصل از مدل حاضر (AA2) در مقایسه با مدل AKS14 و MA22.

مرجع‌ها

[۱] F.Arbabifar, A.N.Khorramian and M.Soleymaninia,, Phys. Rev. D {89}, no.3, 034006 (2014).
[۲] D.de Florian, R.Sassot, M.Stratmann and W.Vogelsang, Phys. Rev. Lett.113, no.1, 012001 (2014).
[۳] E. Leader, A. V. Sidorov, and D. B. Stamenov, *Phys. Rev.D* 82, 114018 (2010).
[۴] C.Adolph et al. [COMPASS], *Phys. Lett. B* 753, 18-28 (2016).
[۵] C.Adolph et al. [COMPASS], *Phys. Lett. B* 769, 34-41 (2017).
[۶] R.Fersch et al. [CLAS], *Phys. Rev. C* 96, no.6, 065208 (2017).
[۷] D. de Florian, R. Sassot, and M. Stratmann, Phys. Rev. D 75, 114010 (2007).
[۸] M. Arneodo et al. (NMC Collaboration), *Phys. Lett. B* 364 (1995).
[۹] A. D. Martin, R. G. Roberts, W. J. Stirling, and R. S. Thorne, Eur. *Phys. J. C* 28, 455 (2003).
[۱۰] A. Piccione and G. Ridolfi, *Nucl. Phys. B* 513, 301 (1998).
[۱۱] A. N. Khorramian, S. Atashbar Tehrani, S. Taheri Monfared, F. Arbabifar and F. I. Olness, *Phys. Rev. D* 83, 054017 (2011).
[۱۲] H. Nematollahi, P. Abolhadi, S. Atashbar, A. Mirjalili and M. M. Yazdanpanah, *Eur. Phys. J. C* 81, no.1, 18 (2021).
[۱۳] Abolfazl Mirjalili , and Shahin Atashbar Tehrani, *Phys. Rev. D* 105, 074023 (2022).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

تابع ساختار کوارک های سنگین در مرتبه NLO با استفاده از روش لاپلاس

زرین ، صلاح الدین ؛ دادفر، ساره

گروه فیزیک دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان

چکیده

در این مقاله ما تابع ساختار کوارک های سنگین $F_{2,L}^{c\bar{c}}(x,Q^2)$ ، $F_{2,L}^{b\bar{b}}(x,Q^2)$ و $F_{2,L}^{t\bar{t}}(x,Q^2)$ را در مرتبه NLO با استفاده از روش لاپلاس بر حسب توابع توزیع کوارکهای ظرفیت و تابع توزیع گلوئون ارائه می دهیم. برای این کار، از معادلات تحولی DGLAP و روش لاپلاس استفاده می کنیم و تابع توزیع گلوئون را بدست می‌آوریم. سپس با استفاده از نتایج این تابع؛ توابع ساختار کوارک‌های سنگین را ارائه می‌دهیم. برای تعیین توابع ساختار کوارک‌های سنگین، توابع ضریب را به روشی مناسب برازش می‌کنیم که می‌توان از آنها در بازه های $m_q^2 \le Q^2$ و $m_q^2 \ge Q^2$ استفاده کرد. برای مشخص کردن اعتبار روش ارائه شده، نتایج عددی بدست آمده را با داده‌های HERA مقایسه می‌کنیم.

واژه های کلیدی: *کوارک- تابع ساختار- توابع تحولی DGLAP*

The heavy quarks structure functions at the NLO approximations by Laplace transforms method

Zarrin, Salaheddin; Dadfar, Sareh

Department of Physics, University of Sistan and Baluchestan, Zahedan

Abstract

We present the heavy quarks structure functions $F_{2,L}^{c\bar{c}}(x,Q^2)$, $F_{2,L}^{b\bar{b}}(x,Q^2)$ and $F_{2,L}^{t\bar{t}}(x,Q^2)$ with respect to the behavior of the gluon and valence quarks distribution function at the NLO approximation. For this aim, the gluon distribution function is obtained by applying the DGLAP evolution equations and the Laplace transform method. Then, by using the results of this function, we present the heavy quarks structure functions. To obtain the structure functions of heavy quarks, the coefficient functions are fitted in a suitable way that can be used in intervals $m_q^2 \le Q^2$ and $m_q^2 \ge Q^2$. To specify the validity of this method, we compare the obtained numerical results with HERA data.

***Keywords**: Heavy Quark- Structure Function- DGLAP Equations*

PACS No. 14.65.Dw, 14.65.Fy, 14.65.Ha

مقدمه :

بررسی برهمکنش‌های ناکشسان ژرف الکترون-پوزیترون، هادرون- هادرون، فوتون – هادرون و لپتون- هادرون ما را در فهم تولید کوارک‌های سنگین که یکی از حوزه‌های مهم تحقیقاتی در فیزیک ذرات بنیادی است، یاری می‌کند [۵-۱]. همچنین اطلاعات ارزشمندی برای فهم و گسترش کرومودینامیک کوانتومی QCD فراهم می‌آورد. اساسی‌ترین اطلاعات در مورد ساختار درونی هادرون‌ها از شتابدهنده حلقه‌ای الکترون- هادرون، HERA، بدست می‌آید. در سال‌های اخیر دو آشکارساز H1 و ZEUS واقع در HERA با انرژی مرکز جرم الکترون- پروتون $\sqrt{s} = 318GeV$، سطح مقطع‌های کاهش یافته $\sigma_r^{c\bar{c}}$ و $\sigma_r^{b\bar{b}}$ و توابع ساختار کوارک‌های افسون $F_2^{c\bar{c}}$ و ته $F_2^{b\bar{b}}$ را ارائه داده‌اند [۶]. نتایج آزمایش‌ها نشان می‌دهند، در محدوده‌ی xهای

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

کوچک، این توابع با رشد تابع توزیع گلوئونی به طور مستقیم افزایش می‌یابند [۱].

از حیث نظری نیز تحقیقات بسیاری برای یافتن چارچوب نظری سازگار با سطح مقطع تولید کوارک‌های سنگین انجام گرفته است و مدل‌های مختلفی برای بدست آوردن توابع ساختار $F_2^{c\bar{c}}$ و $F_2^{b\bar{b}}$ در مرتبه اول (LO) و مرتبه دوم اختلالی (NLO) ارائه شده است [۷-۱۰]. این محاسبات ارتباط بین توزیع گلوئون و توابع ساختار کوارک‌های سنگین در x های پایین را نشان می‌دهد. تولید کوارک‌های سنگین در برهمکنش الکترون- پروتون به توزیع گلوئون، کسر تکانه مینیمم گلوئون x_g ($x_g^{tt} > x_g^{bb} > x_g^{cc}$) و همچنین به جرم کوارک‌ها و مقیاس عاملبندی جرمی μ بستگی دارد. از آنجا که سطح مقطع تولید جفت کوارکهای سنگین وابسته به توابع ساختار $F_L^{q\bar{q}}$ و $F_2^{q\bar{q}}$ آنها می‌باشد، بدست آوردن این توابع ساختار در مراتب بالاتر اختلالی می‌تواند نتایج محاسبات نظری را بهبود بخشد.

ما در این مقاله قصد داریم با استفاده از روش لاپلاس و معادلات تحولی DGLAP، توابع ساختار را برای کوارک‌های افسون، ته و همچین سر، در مرتبه اول و دوم اختلالی با استفاده از توابع توزیع کوارکی و گلوئونی در مقیاس اولیه بدست آوریم. در انتها نتایج عددی را با داده‌های H1 و ZEUS مقایسه خواهیم کرد.

محاسبات:

توابع ساختار کوارکهای سنگین $F_2^{q\bar{q}}$ و $F_L^{q\bar{q}}$ با توجه به رفتار توزیع گلوئون در تقریب اول و دوم به صورت زیر ارائه می شوند:

$$F_{k,g}^{q\bar{q}}(x,Q^2,m_q^2) = x\, e_H^2 \int_x^{\frac{1}{a}} H_{k,g}(z,\xi) \times g\left(\frac{x}{z},\mu^2\right)\frac{dz}{z}, \quad k=2,L \qquad (۱)$$

که در آن μ^2 مقیاس عاملبندی جرم، e_H بار کوارک سنگین، $\frac{1}{a} = z_{\max} = \frac{Q^2}{4m_q^2+Q^2}$ و $\xi = \frac{Q^2}{m_q^2}$ و همچنین $g(z,\mu^2)$ تابع چگالی گلوئون می باشند. در معادله (۱) ضریب $H_{k,g}$ به صورت زیر می باشد.

$$H_{k,g}\left(z,Q^2,\mu^2\right) = \sum_{i=1}^{\infty}\left(\frac{\alpha_s}{4\pi}\right)^i H_{k,g}^{(i)}\left(z,Q^2,\mu^2\right) \qquad (۲)$$

در این معادله $H_{k,g}^{(i)}$، توابع ضریب در مراتب مختلف را نشان می دهد که با استفاده از کد های مختلف ارائه شده و به اندازه‌ای طولانی هستند که ارائه آنها در مقاله امکان پذیر نمی‌باشد. این توابع در مرجع [۱۱] برای $Q^2 \gg m_q^2$ از طریق برازش بدست آمده است و برای $Q^2 \geq m_q^2$ و $Q^2 \leq m_q^2$ نتایج قابل قبولی را ارائه نمی‌دهند. ما با استفاده از روش برازش توانسته‌ایم این توابع را به گونه‌ای بدست بیاوریم که جواب‌های مناسبی را برای توابع ساختار کوارک‌های سنگین ارائه دهد. ما برای برازش توابع از نتایج مرجع [۱۱] استفاده کرده‌ایم و ضرایبی که کنترل کننده توابع در Q^2 های پایین می باشند دارای شکل کلی $a - e^{bQ^2}$ هستند، که در جدول (۱) برای $H_{2,g}$ و $H_{L,g}$ و جرم های مختلف نشان داده شده است. برای حل معادله (۱) و بدست آوردن توابع ساختار کوارکی باید تابع توزیع گلوئون را بدست آوریم، برای این کار ما از معادله DGLAP استفاده می کنیم که به صورت زیر می باشند [۱۲-۱۴].

$$\frac{\partial F_s\left(x,Q^2\right)}{\partial \ln Q^2} = \frac{\alpha_s}{2\pi}\left[P_{qq}\left(x,Q^2\right)\otimes F_s\left(x,Q^2\right) + 2n_f\, P_{qg}\left(x,Q^2\right)\otimes G\left(x,Q^2\right)\right]$$
$$\frac{\partial G\left(x,Q^2\right)}{\partial \ln Q^2} = \frac{\alpha_s}{2\pi}\left[P_{gq}\left(x,Q^2\right)\otimes F_s\left(x,Q^2\right) + P_{gg}\left(x,Q^2\right)\otimes G\left(x,Q^2\right)\right] \qquad (۳)$$

حالا با استفاده از تغییر متغیر $x \equiv e^{-v}$ ، $y \equiv e^{-w}$ و $\tau = \frac{1}{4\pi}\int_{Q_0^2}^{Q^2}\alpha_s\left(Q'^2\right)d\ln Q'^2$ و استفاده از تبدیل لاپلاس می‌توانیم معادلات بالا را از فضای ν به فضای s ببریم که به صورت زیر بدست می آید.

$$f^{(i)}(s,Q^2) = k_{ff}^{(i)}(s,\tau)\,f^{(i)}(s,Q_0^2) + k_{fg}^{(i)}(s,\tau)g^{(i)}(s,Q_0^2) \quad (۴)$$

$$g^{(i)}(s,Q^2) = k_{gf}^{(i)}(s,\tau)\,f^{(i)}(s,Q_0^2) + k_{gg}^{(i)}(s,\tau)g^{(i)}(s,Q_0^2) \quad (۵)$$

ضرایب $k^{(i)}$ (i=LO , NLO) را در مرجع [۱۵] داده شده اند.

حالا معادله (۱) را با استفاده از تغییر متغیر $x \equiv \frac{y}{a}$ به صورت زیر بدست می آید.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$$F_{k,g}^{q\bar{q}}(\frac{y}{a},Q^2,m_q^2)=e_H^2\int_y^1 K_{k,g}(\frac{y}{az},\xi)\times G(z,\mu^2)\frac{dz}{z},\quad k=2,L \qquad (٦)$$

که در معادله بالا $K_{k,g}(\frac{y}{az},\xi)=\frac{y}{az}H_{k,g}(\frac{y}{az},\xi)$. در ادامه با استفاده از تغییر متغییرهای $y\equiv e^{-v}$ و $z\equiv e^{-w}$ می‌توانیم معادله بالا را به فضای s ببریم که به صورت زیر بدست می آید.

$$f_{k,g}^{q\bar{q}}(s,Q^2,m_q^2)=\frac{1}{a^s}e_H^2\,g(s,\mu^2)\,k_{k,g}(s,\xi), \qquad (٧)$$

که $k_{k,g}(s,\xi)=L\left(K\left(e^{-v+\ln 1/a}\right),v,s\right)$. برای بدست آوردن تابع ساختار کوارک های سنگین در فضای s باید معادله (۵) را در معادله (۷) قرار دهیم که به صورت زیر بدست می‌آید.

$$f_{k,g}^{q\bar{q}}(s,Q^2,m_q^2)=e_H^2\left[j_{gf}(s,M^2)f(s,Q_0^2)+j_{gg}(s,M^2)g(s,Q_0^2)\right],\quad k=2,L \qquad (٨)$$

در معادله بالا ضرایب به صورت زیر می‌باشند.

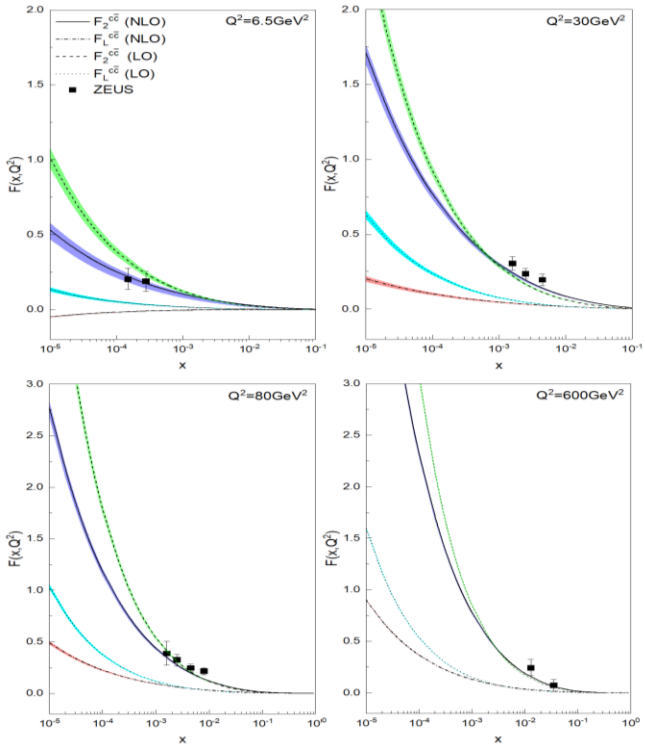
$$j_{gf}(s,M^2)=h_{k,g}(s,\xi)k_{fg}(s,\tau(M^2,Q_0^2))/a_s^2$$
$$j_{gg}(s,M^2)=h_{k,g}(s,\xi)k_{gg}(s,\tau(M^2,Q_0^2))/a_s^2 \qquad (٩)$$

در انتها برای بدست آوردن تابع ساختار کوارکی در فضای x کافی است از معادله (۸) لاپلاس معکوس بگیریم.

نتایج عددی

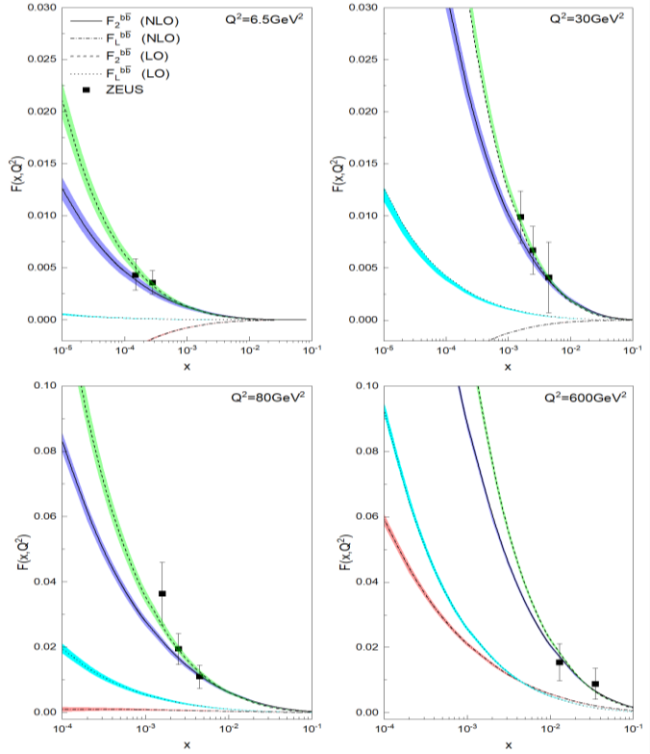
در ادامه می‌خواهیم با استفاده از معادلات بدست آمده نتایج عددی توابع ساختار کوارک های سنگین را ارائه دهیم و همچنین نتایج بدست آمده را با داده های تجربی HERA که از آشکارسازهای H1 و ZEUS بدست آمده، مقایسه کنیم [٦]. برای بدست آوردن نتایج عددی پارامتر قطع کرومودینامیک کوانتومی در مرتبه اول اختلالی $\Lambda^{LO}_{n_f=4,5,6}=0.192,0.146,0.11\,GeV$ و در مرتبه دوم اختلالی $\Lambda^{NLO}_{n_f=4,5,6}=0.269\,,0.184,0.12\,GeV$ در نظر گرفته ایم [١٦].

در شکل (۱) نتایج عددی مربوط به توابع ساختار کوارک افسون در مقیاس‌های $Q^2=6.5,30,80,600GeV^2$ نشان داده شده است که $F_2^{c\bar{c}}(x,Q^2)$ با نتایج داده های HERA مقایسه شده اند. نتایج عددی نشان می دهند که، تابع ساختار طولی این کوارک می‌تواند در نتایج سطح مقطع کل اثر قابل ملاحظه ای داشته باشد و همچنین مرتبه دوم اختلالی می‌تواند اثری مناسبی در اصلاح نتایج داشته باشد. در شکل (۲) نتایج عددی مربوط به توابع ساختار کوارک ته را در مقایس های انرژی $Q^2=6.5,30,80,600GeV^2$ نشان داده ایم. در این شکل نتایج $F_2^{b\bar{b}}(x,Q^2)$ با داده های HERA مقایسه شده است. این نتایج نشان می‌دهند که سهم تابع ساختار طولی این کوارک در مرتبه دوم اختلالی در انرژی‌های پایین تر از مربع جرم این کوارک منفی می-باشند و سهمی در سطح مقطع آن ندارند. در شکل (۳) ما نتایج عددی مربوط به کوارک سر را در مقیاس های $Q^2=6.5,30,80,600GeV^2$ نمایش داده‌ایم. همانطور که در این شکل مشاهده می‌شود توابع ساختار طولی در مرتبه اول اختلالی وجود دارد اما در مرتبه دوم اختلالی فقط در انرژی های بالاتر از مربع جرم کوارک سر ظاهر می شود.



شکل(۱) : تابع ساختار $F_2^{c\bar{c}}(x,Q^2)$ و $F_L^{c\bar{c}}(x,Q^2)$ در مرتبه اول و دوم اختلالی که تابع $F_2^{c\bar{c}}(x,Q^2)$ با نتایج داده های HERA [٦] مقایسه شده است.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



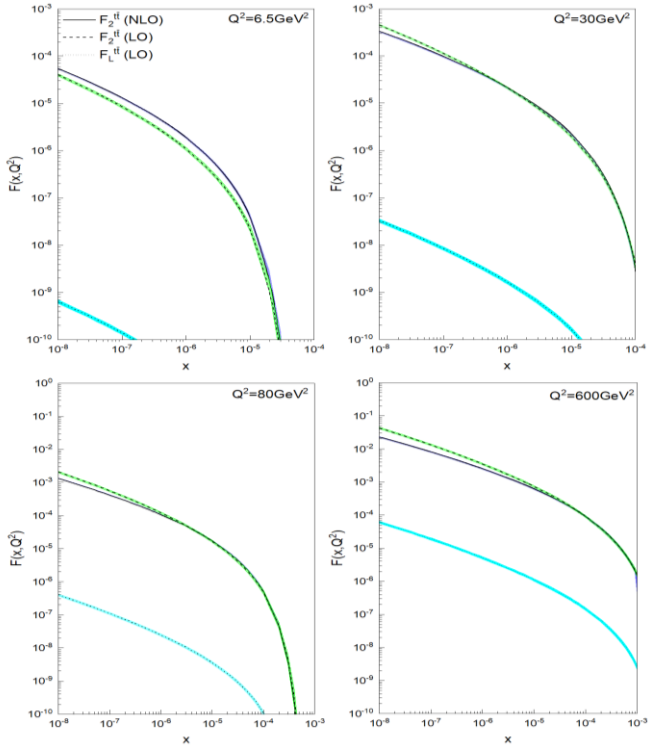
شکل(۲) : تابع ساختار های $F_2^{b\bar{b}}(x,Q^2)$ و $F_L^{b\bar{b}}(x,Q^2)$ در مرتبه اول و دوم اختلالی که تابع $F_2^{b\bar{b}}(x,Q^2)$ با نتایج داده های HERA [٦] مقایسه شده است.

جدول۱ : ضرایب موجود در تابع کنترل توابع ضریب کوارک های سنگین.

جرم کوارکی	a	b
$m_c\left(H_{2,g}\right)$	۱,۰۱۵۲۳٦۹	$-۱۱,۵۵٤۸\times۱۰^{-٤}$
$m_b\left(H_{2,g}\right)$	۱,۰۰۳٦٦۸۷	$-۲۳,۵۸٤۲\times۱۰^{-۵}$
$m_t\left(H_{2,g}\right)$	۱,۰۰۰۰۱۱	$-۸,۹۳٦۹۷\times۱۰^{-۸}$
$m_q\left(H_{L,g}\right)$	۰,۹٤۷۲۳۲	$-m_q^2$ ۷۱,۰۸۰۷$\times۱۰^{-۳}$

نتیجه گیری

ما در این مقاله با استفاده از روش لاپلاس و معادلات تحولی DGLAP و همچنین با به کار بردن یک برازش مناسب از توابع ضریب کوارک های سنگین توانستیم توابع ساختار را برای کوارک های سنگین افسون، ته بدست آوریم. مقایسه نتایج عددی بدست آمده با داده‌های HERA اعتبار محاسبات را نشان می دهند. همچنین در این کار ما توانسته‌ایم توابع ساختار کوارک سر را به عنوان یک پیشبینی ارائه دهیم. با استفاده از نتایج توابع ساختار کوارک سر می توان سطح مقطع تولید جفت کوارک سر را در برهمکنش الکترون- پروتون پیشینی کرد.



شکل(۳) : در این شکل تابع ساختار $F_2^{t\bar{t}}(x,Q^2)$ در مرتبه اول و دوم اختلالی و تابع ساختار $F_L^{t\bar{t}}(x,Q^2)$ در مرتبه اول اختلالی نمایش داده شده است.

مرجع‌ها

[۱] F. D. Aaron et al. (H1 Collaboration), Eur. Phys. J. C 65, 89 (2010).
[۲] H. Abramowicz et al. (ZEUS Collaboration), JHEP 09, 127 (2014)
[۳] H. Abramowicz et al. (H1 and ZEUS Collaboration), Eur. Phys. J. C 78, 473 (2018).
[٤] H. Abramowicz et al. (H1 and ZEUS Collaboration), DESY-12-172, arXiv:1211.1182v2[hep-ex](2012).
[٥] H. Abramowicz et al. (ZEUS Collaboration), Eur. Phys. J. C 69, 347 (2010).
[٦] H Abramowicz, et al. JHEP 09, 1 (2014).
[۷] N.N. Nikolaev, V.R. Zoller, Phys. At. Nucl. 73 (2010) 672.
[۸] A.V. Kotikov, A.V. Lipatov, G. Parente, N.P. Zotov, Eur. Phys. J. C 26, 51 (2002).
[۹] A.Y. Illarionov, B.A. Kniehl, A.V. Kotikov, Phys. Lett. B 663, 66 (2008).
[۱۰] N.Ya. Ivanov, B.A. Kniehl, Eur. Phys. J. C 59, 647 (2009).
[۱۱] M. Buza, Y, Smith J, Migneron R, Van Neerven WL. Nuclear Physics B. 1996 472, 611-58 (3).
[۱۲] V.N. Gribov, Lipatov LN, Inst. of Nuclear Physics, Leningrad; (1972) Jan 1.
[۱۳] V.N. Gribov, L.N. Lipatov, Yadern. Fiz. 15(6):1218-37(1972).
[۱٤] Y.L. Dokshitzer. Zh. Eksp. Teor. Fiz. Jan 1;73(1216) 26 (1977).
[۱٥] S.Zarrin, S. Dadfar IJTP 60(10), 3822-49 (2021).
[۱٦] H. L. Lai, J. Huston, S. Kuhlmann, J. Morfin, F. Olness, J. F. Owens, J. Pumplin, and W. K. Tung, Eur. Phys. J. C 12, no. 3 (2000): 375-392.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

سطح مقطع گوه درهم‌تنیدگی در پس‌زمینه‌های دارای گروه بازبهنجارش هولوگرافی

محمدجواد وصلی، کمیل بابائی ولنی، محمدرضا محمدی‌مظفر

گروه فیزیک، دانشکده‌ی علوم پایه، دانشگاه گیلان

چکیده

در این مقاله با استفاده از دوگانی گرانش-پیمانه‌ای، سطح مقطع گوه درهم‌تنیدگی را برای هندسه‌های مشخصی محاسبه می‌کنیم که نشان‌دهنده‌ی جریان گروه بازبهنجارش در گرانش اینشتین هستند. متریک متناظر در این پس‌زمینه‌ها در هر دو ناحیه فروسرخ و فرابنفش به فضای پاددوسیته تبدیل می شود. به منظور یافتن سطح مقطع گوه درهم‌تنیدگی از پیشنهاده هولوگرافی ارایه شده در هندسه‌های ایستا استفاده می‌کنیم. این کمیت را برای زیرسیستم‌های نواری شکل بررسی کرده و گذار فاز آن را برای مقادیر گوناگونی از پارامترها در ابعاد مختلف مطالعه می‌نماییم. همچنین رفتار سطح مقطع گوه درهم‌تنیدگی را به عنوان تابعی از پارامترهایی مطالعه می‌کنیم که تندی تغییرات در جریان گروه بازبهنجارش را میان دو نقطه ثابت در نواحی فروسرخ و فرابنفش تعیین می‌کنند.

Entanglement wedge cross-section in backgrounds with holographic RG flows

Vasli, Mohammad Javad; Babaei Velni, Komeil; Mohammadi Mozaffar,Mohammad Reza

Department of Physics, University of Guilan

Abstract

In this paper using gauge/gravity duality, we compute entanglement wedge cross-section (EWCS) for specific backgrounds which exhibit holographic RG flow in Einstein gravity. The corresponding metric in these geometries approaches that of AdS in both of IR and UV limits. In order to compute the EWCS, we employ the holographic proposal for static geometries. We study this quantity in these geometries for strip shaped subsystems and investigate the phase transition of EWCS for different values of the parameters in various dimensions. We also study the behavior of EWCS as a function of the parameter which controls the sharpness of the transition in the holographic RG flow between the IR and UV fixed points.

Key Words: Entanglement wedge cross section, gauge/gravity duality, holographic renormalization

مقدمه

در سال‌های اخیر مطالعه سنجه‌های درهم‌تنیدگی با بهره‌گیری از دوگانی‌گرانش-پیمانه‌ای و به‌ویژه هم‌ارزی پاددوسیته-همدیس (AdS/CFT) به یکی از زمینه‌های مورد علاقه پژوهش‌گران تبدیل شده است[1]. ریو و تاکایاناگی نخستین نسخه‌ی هولوگرافی ارائه شده برای یک سنجه درهم‌تنیدگی را معرفی کردند که بر طبق آن محاسبه‌ی آنتروپی درهم‌تنیدگی برای ناحیه‌ای هندسی در سمت نظریه میدان، به محاسبه مساحت یک سطح مشخص در سمت گرانش تقلیل می‌یافت. بر اساس این پیشنهاده آنتروپی درهم‌تنیدگی برای یک زیرناحیه‌ی هندسی مرزی، متناسب با کمترین مساحت ممکن برای سطحی در سمت نظریه گرانشی است که دارای مرز

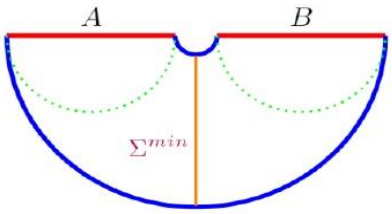
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

یکسانی با این زیرناحیه باشد [2]. بر این اساس مقدار این کمیت برای زیرناحیه‌ی A به صورت زیر یافت می‌شود:

$$S(A)=\frac{\min(\Gamma_A)}{4G_N} \qquad (1)$$

که در آن Γ_A ابرسطح کمینه (سطح ریو-تاکایاناگی) و G_N ثابت نیوتن در بعد مورد نظر است.

با توجه به این پیشنهاد می‌توان انتظار داشت برای سایر سنجه‌های درهم‌تنیدگی نیز بتوان موجودات متناظری را در قالب دوگانی‌گرانش-پیمانه‌ای بیابیم. بر این اساس مساحت کمینه‌ی دیگری که در سال‌های اخیر مورد مطالعه قرار گرفته است سطح مقطع گوه درهم‌تنیدگی نام دارد. این کمیت در تناظر با تعدادی از سنجه‌های درهم‌تنیدگی مرزی پیشنهاد شده است. به عنوان یک مثال ساده، در شکل ۱ سطوح ریو-تاکایاناگی و سطح مقطع گوه درهم‌تنیدگی Σ_{AB}^{min} را برای حالتی متشکل از نواحی مرزی متقارن نمایش داده ایم. همان‌گونه که از این تصویر مشخص است، با استفاده از نقاط بازگشت سطوح ریو-تاکایاناگی می‌توان مساحت این سطح را به دست آورد[6].



شکل ۱: Σ_{AB}^{min} برای حالت متقارن که طول دو زیر ناحیه A و B برابر در نظر گرفته شده است. می‌توان نشان داد هنگامی که به فاز ناپیوسته می‌رویم مطابق انتظار این کمیت برابر صفر خواهد شد.

بررسی سطح مقطع گوه درهم‌تنیدگی نشان می‌دهد که یک گذار فاز ناپیوسته در این کمیت وجود داشته که طی آن با افزایش فاصله‌ی هندسی بین دو زیرناحیه و بعد از یک فاصله‌ی بحرانی، مقدار این کمیت صفر می‌شود. این ویژگی به دلیل تغییر ناگهانی آرایش‌های سطوح ریو-تاکایاناگی بوده که با افزایش فاصله از یک ساختار پیوسته (خطوط آبی رنگ) به یک ساختار ناپیوسته (خط‌چین سبز رنگ) تبدیل شده‌اند. در واقع هنگامی که دو زیرناحیه دارای جدایی هندسی زیادی شوند، به طور کامل از یکدیگر مستقل شده و در نتیجه اطلاعات مشترک میان آن‌ها صفر خواهد شد.

با مطالعه سطح مقطع گوه درهم‌تنیدگی ویژگی‌های فیزیکی جالبی به دست خواهد آمد. بر اساس همین ویژگی‌ها، در سمت نظریه میدان سنجه‌های متفاوتی به عنوان دوگان هولوگرافی با این کمیت پیشنهاد شده است که از جمله آن‌ها می‌توان به آنتروپی خالص‌سازی و آنتروپی انعکاسی اشاره نمود. در مقاله‌ی پیش‌رو قصد داریم با در نظر گرفتن یک پس‌زمینه‌ی گرانشی که دارای دو ناحیه‌ی مجانبی به صورت فضازمان پاددوسیته است، رفتار سطح مقطع گوه درهم‌تنیدگی را بررسی نماییم.

پس‌زمینه‌ی گرانشی و محاسبه سطح مقطع گوه درهم‌تنیدگی

هندسه‌ی گرانشی مورد نظر در مرجع [5] جهت بررسی جریان گروه بازبهنجارش و یافتن یک تابع همواره کاهشی تحت این گروه با استفاده از آنتروپی درهم‌تنیدگی معرفی شده است. از آن‌جایی که برای چنین محاسبه‌ای نیازمند به دو نقطه‌ی ثابت (متناظر با دو نظریه‌ی میدان همدیس) در مسیر بازبهنجارش هستیم لذا متریک گرانشی به گونه‌ای ساخته شده که دارای دو فضازمان مجانبی پاددوسیته باشد. شکل عمومی چنین متریکی به صورت زیر در نظر گرفته شده است:

$$ds^2 = f(r)^2\eta_{\mu\nu}dx^\mu dx^\nu + dr^2, \qquad (2)$$

که در آن r مختصه‌ی شعاعی فضازمان بوده و نواحی فرابنفش و فروسرخ به ترتیب متناظر با $r=+\infty$ و $r=-\infty$ هستند. همان‌گونه که در [5] توصیف شده است برای داشتن نواحی مجانبی پاددوسیته یک انتخاب ساده و هموار برای تابع f(r) به صورت زیر است:

$$f(r) = e^{\frac{r}{L}}\left(2\cosh\frac{r}{R}\right)^{-\gamma}, \qquad (3)$$

که در آن γ، L و R پارامترهای تاثیرگذار بر نحوه‌ی رفتار جریان گروه بازبهنجارش می‌باشند. به ویژه پارامتر R که میزان تندی تغییرات بین دو مقیاس شعاعی فضاهای پاددوسیته را مشخص می‌کند. همچنین در حدهای مجانبی فروسرخ و فرابنفش شعاع متناظر با این فضازمان ها بر حسب پارامترهای متریک تعیین می‌شوند. علاوه بر این در حدهای مجانبی فروسرخ و فرابنفش شعاع

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

متناظر با این فضازمان‌ها بر حسب پارامترهای متریک به صورت زیر تعیین می‌شوند:

$$\frac{1}{L_{UV}}=\frac{1}{L}-\frac{\gamma}{R},\quad \frac{1}{L_{IR}}=\frac{1}{L}+\frac{\gamma}{R}.$$

مدل دیگری که بدین منظور در نظر گرفته شده نیز دارای تابعیتی به شکل زیر است:

$$f(r)=e^{\frac{r}{L}}\left(e^{\frac{2r}{L}}+\sigma+e^{\frac{-2r}{L}}\right)^{-\gamma/2}, \qquad (4)$$

که در این حالت میزان تندی تغییرات بین دو مقیاس شعاعی فضاهای پادوسیته توسط پارامترهای R و σ مشخص می‌شود. در ادامه متریک‌های متناظر با روابط (3) و (4) را به ترتیب مدل‌های اول و دوم می‌نامیم.

برای محاسبه‌ی سطح مقطع گوه درهم‌تنیدگی، زیرناحیه‌ی مرزی را در یک برش زمان ثابت و متشکل از دو نوار باریک و بلند با عرض l و فاصله‌ی h در راستای محور x در نظر می‌گیریم. برای چنین آرایشی تابعی سطح مقطع گوه درهم‌تنیدگی در حالت متقارن به صورت زیر است

$$E_W=\frac{H^{d-2}}{4G_N}\int_{r_t^{(h)}}^{r_t^{(2\ell+h)}} f^{(d-2)}\,dr, \qquad (5)$$

که در آن $r_t^{(h)}$ و $r_t^{(2\ell+h)}$ به ترتیب نقاط بازگشت مربوط سطح ریو-تاکایاناگی متناظر با زیر ناحیه‌هایی با طول h و 2l+h بوده و به کمک تابعی آنتروپی درهم‌تنیدگی قابل محاسبه هستند. با انتخاب تابعیت r=r(x) و استفاده از متریک (2) تابعی آنتروپی به صورت زیر حاصل می‌شود:

$$S=\frac{H^{d-2}}{4G_N}\int f^{(d-2)}\sqrt{f^2+\dot{r}^2}, \qquad (6)$$

که در آن H طول نوار را در ابعاد فضایی دیگر نشان می‌دهد. از آن‌جایی که تابعی بالا صراحتا به x وابسته نیست، هامیلتونی متناظر ثابت بوده و لذا معادله‌ی سطح کمینه برحسب یک ثابت حرکت بدست می‌آید. این ثابت حرکت را می‌توان برحسب نقطه‌ی بازگشت ابرسطح از داخل حجم گرانشی (r_t) پیدا کرد. بدین ترتیب طول ناحیه بر حسب نقطه بازگشت به صورت زیر درخواهد آمد:

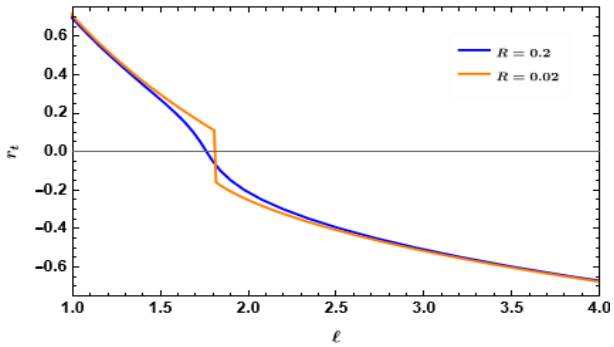
$$\ell(r_t)=2\int_{r_t}^{\infty}dr\,\frac{f(r_t)^d}{\sqrt{f(r)^{2d}f(r_t)^2-f(r_t)^{2d}f(r)^2}}.$$

در نتیجه با استفاده از این رابطه و رابطه‌ی(5) می‌توان سطح مقطع گوه درهم‌تنیدگی را در هندسه‌ی مورد نظر محاسبه نمود.

نتیجه‌گیری

نتایج عددی محاسبات انجام‌شده در شکل‌های ۲ و ۳ برای نظریه‌های میدان 2 و3 بعدی در دو مدل مورد نظر به ازای مقادیر مختلف R نمایش داده شده است. همچنین سایر پارامترها به صورت $\gamma=\frac{R}{2}$، $L=\frac{2}{3}$ و $\sigma=10^{-5}$ ثابت شده‌اند. به ازای مقادیر مشخص شده اندازه‌ی شعاع فضای پادوسیته در ناحیه‌ی فرابنفش همواره برابر با واحد خواهد بود $(L_{UV}=1)$. شایان ذکر است که رفتار کیفی نمودارها مستقل از پارامترها و بعد نظریه‌ی مرزی بوده و لذا در گزارش نتایج به همین مقادیر بسنده شده است.

در شکل ۲ تابعیت نقطه‌ی بازگشت ابرسطح از داخل توده‌ی گرانشی برحسب طول زیرناحیه رسم شده است. همان گونه که گفته شد، نقطه‌ی بازگشت ابرسطح از این جهت دارای اهمیت است که به کمک آن می‌توانیم سطح مقطع گوه درهم‌تنیدگی را محاسبه نماییم. نکته‌ی بسیار مهم در این نمودار چند مقدار شدن نقطه‌ی بازگشت به ازای مقادیر کوچک پارامتر R است. در این حالت سطح فرینه حاصل از حل معادله‌ی حرکت یکتا نیست. از آن جایی که بر طبق نسخه‌ی هولوگرافی باید سطح دارای کمینه‌ی مساحت را انتخاب نماییم لذا به ازای مقادیر مشخصی از طول زیرناحیه‌ی درهم‌تنیدگی یک گسستگی در نمودار مربوطه بروز می نماید. این رفتار برای اولین بار در مرجع [5] گزارش شده است. این شکل تنها برای مدل اول رسم شده لیکن نتایج مشابهی در مدل دوم نیز برقرار است. همان طور که در ادامه خواهیم دید، اثرات این گسستگی خود را در سطح مقطع گوه درهم‌تنیدگی نشان خواهد داد.

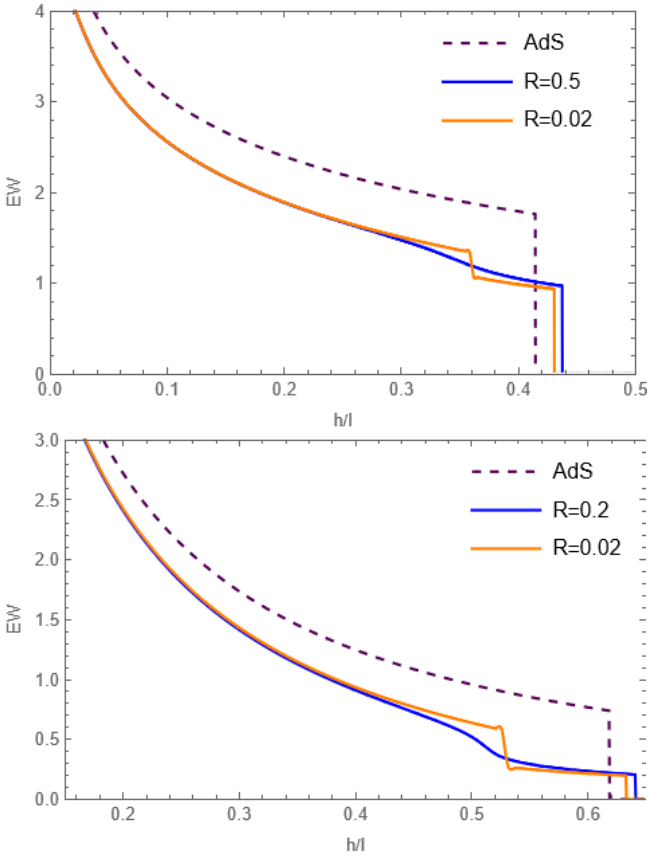


شکل۲. نقطه‌ی بازگشت ابرسطح کمینه از داخل توده‌ی گرانشی برحسب طول زیرناحیه مرزی به ازای d=2 در مدل اول.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

شکل ۳ نشان‌دهنده‌ی تابعیت سطح مقطع گوه درهم‌تنیدگی برحسب نسبت بدون بعد فاصله به طول نواحی است. برای مقایسه‌ی بهتر این کمیت، نتایج متناظر با فضازمان پاددوسیته‌ی خالص نیز به صورت خط چین در این شکل نمایش داده شده است. کاهش سطح مقطع گوه درهم‌تنیدگی با افزایش فاصله و گذار فاز منجر به مقدار صفر، از نمودارها مشهود است. همچنین مشاهده می‌شود که با افزایش مقدار R، نقطه‌ی گذار فاز به فواصل بیشتر انتقال می‌یابد. چنان‌چه ملاحظه می‌شود با کاهش R (منحنی‌های نارنجی رنگ در شکل‌ها) یک شکستگی در نمودار ظاهر شده است (به ازای d=2, 3 به ترتیب در $h = 0.36\ell$ و $h = 0.52\ell$). این اتفاق به ازای مقادیر بزرگتر R مشاهده نمی‌شود. در واقع این شکستگی ناشی از عبور سطوح ریو-تاکایاناگی متناظر با زیرناحیه‌های مرزی از ناحیه‌ای داخل توده‌ی گرانشی است که فضازمان‌های پاددوسیته را به یکدیگر متصل کرده است. این رفتار مشابه با گذار فاز مشاهده شده برای ضریب جهانشمول آنتروپی درهم‌تنیدگی در [4] است. از طرف دیگر با توجه به این نکته که سطح مقطع گوه درهم‌تنیدگی نشان‌دهنده میزان همبستگی میان دو زیرناحیه است می‌توان نتیجه گرفت قبل از نقطه شکستگی افزایش میزان R موجب کاهش همبستگی بین دو زیرناحیه شده است. اما با عبور از نقطه‌ی شکستگی این رفتار معکوس شده و با افزایش R همبستگی میان این دو زیر ناحیه افزایش می‌یابد.

به عنوان یکی از جنبه‌های پژوهشی جالب توجه در مطالعات آینده می‌توان به در نظر گرفتن اثرات ناشی از جریان بازهنجارش هولوگرافی بر روی سایر سنجه‌های اطلاعات و درهمتنیدگی از جمله آنتروپی فرد [7] اشاره نمود.



شکل۳. سطح مقطع گوه درهم‌تنیدگی برحسب نسبت فاصله به طول زیرناحیه‌ها. بالا: مدل اول به ازای d=3 و $\ell = 2$. پایین: مدل دوم به ازای d=2 و $\ell = 5$. در هر مورد خط چین نشان‌دهنده‌ی نتایج برای فضای پاددوسیته با $\gamma = 0$ است.

مرجع‌ها

[1] J. M. Maldacena, *Int. J. Theor. Phys.***38**, 1113 (1999).
[2] S. Ryu and T. Takayanagi, *Phys. Rev. Lett.***96**, (2006).
[3] M. Rangamani and T. Takayanagi, *Lect. Notes Phys.***931**, (2017)
[4] M. Headrick, *Phys. Rev. D***82,** 126010 (2010).
[5] R. C. Myers and A. Singh, *JHEP***04** 122 (2012).
[6] T.Takayanagi and K.Umemoto, *Nature Phys.***14**, (2018).
[7] K. Tamaoka, Phys.Rev. Lett. 122, no. 14, 141601 (2019).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

اثر تصحیحات NLO تابع ترکش در تولید مستقیم مزون B^+

دادفر، ساره ؛ زرین ، صلاح الدین

گروه فیزیک دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان

چکیده

در این مقاله سطح مقطع تولید مزون سبک –سنگین B^+ را از طریق فرایند ترکش $\bar{b} \to \bar{b}u + \bar{u}$ در دقت مرتبه دوم ارائه می‌دهیم. برای این منظور سهم تصحیحات حقیقی و مجازی در تابع ترکش محاسبه می‌شوند. در حین محاسبات، واگرایی‌ها و تکینگی‌های ظاهر شده در تابع ترکش، با استفاده از روش تکه کردن فضای فاز دو برشی حذف می‌شوند. سپس با استفاده از قضیه عاملبندی، تابع ترکش معین نهایی، برای ارائه نتایج عددی سطح مقطع مزون B^+ بکار گرفته می‌شوند. در انتها نتایج ما با داده های LHC و Tevatron Run II مقایسه می‌شوند.

واژه های کلیدی: *سطح مقطع- تابع ترکش- تصحیحات NLO*

The effect of NLO corrections to the production cross section of B^+ meson

Dadfar, Sareh; Zarrin, Salaheddin

Department of Physics, University of Sistan and Baluchestan, Zahedan

Abstract

In this paper, we present the production cross section of heavy- light meson B^+ via the fragmentation process of $\bar{b} \to bu + \bar{u}$ at the next-to-leading-order accuracy. To do this, the contributions of virtual and real corrections are calculated in the fragmentation function. In the course of calculations, the appeared divergences and singularities in fragmentation function are canceled by using the two-cutoff phase-space slicing method. Then, by using factorization theorem, the final finite fragmentation function is applied to present the numerical results of the production cross section of meson B^+ . Finally, our numerical results are compared with the LHC and Tevatron Run II data.

***Keywords**: cross section- fragmentation function-NLO correction*

PACS No. 13.60.Le, 13.85.Lg

مقدمه :

در سال‌های اخیر تلاش‌های موفقیت آمیزی در فیزیک انرژی بالا برای شناسایی ترکیبات بنیادی مواد و فهم برهم‌کنش‌های بنیادین بین آنها صورت گرفته است. در برخورد دهنده‌های هادرونی به وفور مزون‌ها با حداقل یک طعم سنگین تولید و واپاشی می‌شوند. در ناحیه تکانه عرضی بالا مکانیسم غالب در تولید یک هادرون سنگین، ترکش پارتونی است، که بیانگر چگالی احتمال تولید یک هادرون از پارتون اولیه می‌باشد. از لحاظ نظری، اهمیت توابع ترکش در محاسبه سطح مقطع تولید و کسر انشعاب مدهای مختلف واپاشی ذرات و همچنین بررسی منشا اسپین ذرات می باشد. تاکنون برای توصیف نحوه تولید مزونهای سبک- سنگین از طریق فرایند ترکش، مدل‌های نظری مختلفی ارائه شده است که عموماً در مرتبه اول اختلالی می‌باشند [1-4]. هر مدل در بردارنده پارامترهای مختلفی است که می‌تواند در نتایج نظری تاثیر گذار باشد. اولین تابع ترکش یک کوارک سنگین به مزون سبک–سنگین اول اختلالی (LO) توسط پیترسون [1] ارائه شد که با عکس مربع اختلاف انرژی بین حالت نهایی و انرژی حالت اولیه متناسب

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

است. مدل سوزوکی [3] حاوی اطلاعات اسپینی ذرات نهایی و اولیه می‌باشد و پارامتر موثر در این مدل متوسط مربع تکانه عرضی کوارک نهایی است. در این مدل تابع ترکش با صرفنظر از حرکت فرمی کوارک‌های تشکیل دهنده مزون و انتگرالگیری روی تکانه عرضی پارتون نهایی و میانگین گیری روی اسپین کوارک سنگین اولیه و جمع روی اسپین کوارک نهایی در مرتبه اول اختلالی، محاسبه می‌شود. هرچند محاسبات درLO اغلب می‌تواند توصیف نسبتاً خوبی از فرایندهای فیزیکی ارائه دهد اما در موارد بسیاری پیشگویی‌های نظری در این مرتبه با داده‌های آزمایشی تطابق ندارد. از اینرو به منظور بهبود بخشیدن نتایج محاسبات نظری، اعمال NLO ضرورت پیدا می‌کند. در سالهای اخیر تصحیحات NLO تابع ترکش کوارک سنگین به مزونهای سبک –سنگین [5] و مزونهای سنگین- سنگین [6-9] ارائه شده است. از این توابع ترکش با استفاده از قرار دادن تابع ترکش در قضیه عاملبندی QCD، سطح مقطع تولید هادرون‌های مختلف را می‌توان محاسبه نمود. محاسبه سطح مقطع هادرون‌ها با ترکیبی از تکنیک‌های تحلیلی و انتگرالگیری‌های عددی انجام می‌گیرد.

در این مقاله قصد داریم از محاسبات اخیرمان [5و9] که برای تابع ترکش به مزونهای سبک- سنگین در دقت NLO ارائه شده است، استفاده کنیم و سطح مقطع تولید مزون B^+ را بدست می‌آوریم. برای این منظور از نظریه کرومودینامیک کوانتومی اختلالی (PQCD)، قضیه عاملبندی، تابع ترکش (که برای تحول آن از معادلات تحولی التارلی- پاریزی استفاده شده) استفاده نموده و به ارزیابی سطح مقطع تولید هادرون نهایی مورد نظرمان در تقریب LO و NLO می‌پردازیم.

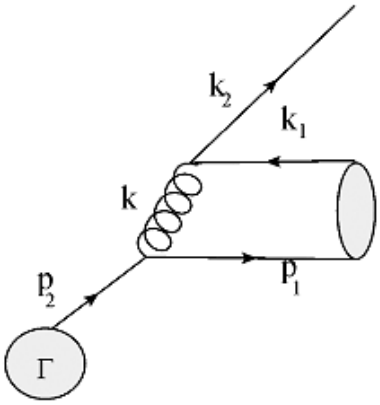
در ابتدا خلاصه ای از روند محاسبه تصحیحات NLO برای فرایند $\bar{b}\to \bar{b}u+\bar{u}$ را بیان می‌کنیم. در حین محاسبات، برای حذف واگرایی‌های ظاهر شده در محاسبات از منظم سازی ابعادی و از روش تکه کردن فضای فاز دو برشی[1] [10] استفاده کرده‌ایم. لازم به ذکر است که اولین بار ما این روش را در محاسبه تابع ترکش NLO به کار گرفتیم. در انتها نیز به مقایسه نتایج عددی سطح مقطع حاصل از روش ما با پیشگویی‌های نظری دیگر و نتایج آزمایشی در دسترس پرداخته می‌شود.

محاسبات:

با استفاده از روش عاملبندی می‌توان توزیع دیفرانسیلی سطح مقطع تولید هادرون‌ها بر حسب توزیع تکانه عرضی آنها ، p_T ، را به صورت زیر نوشت:

$$d\sigma_{\bar{b}\to B^+}=\int_0^1 dx_A dx_B f_{a_A}(x_A,\mu_F) f_{a_B}(x_B,\mu_F) \times dz d\hat{\sigma}(\mu_F) D_{\bar{b}\to B^+}(z,\mu_F) \quad (1)$$

که در آن $\hat{\sigma}$ سطح مقطع پراکندگی سخت تولید کوارک سنگین اولیه و $D_{\bar{b}\to B^+}(z,\mu_F)$ تابع ترکش تحول یافته مربوط به مزون B^+ در مقیاس عاملبندی μ_F می‌باشند. بعلاوه f_{a_A} و f_{a_B} توابع توزیع پارتونی با کسر تکانه های x_A و x_B مربوط به پروتون‌ها و a_A و a_B چهاربردارپارتونی می‌باشند. نمودار این فرایند در تقریب LO مطابق شکل (1) می باشد.



شکل(1): نمودار فاینمن مرتبه اول

قدم اول در محاسبه سطح مقطع تولید مستقیم مزون B^+ در مرتبه دوم اختلالی، محاسبه تابع ترکش فرایند $\bar{b}\to \bar{b}u+\bar{u}$ در دقت NLO می‌باشد که مختصراً به نحوه محاسبه آن می‌پردازیم. تابع ترکش کلی برای این فرایند در دقت NLO به صورت زیر است:

$$D(z)=D_{LO}(z)+D_{NLO}(z) \quad (2)$$

[1] Two cuts off slicing method

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

$$D_{LO}(z) = N\int dPS_2 \left|M_{LO}\right|^2 \quad (3)$$

$$D^{NLO}(z) = \int dPS_2 \left|M_{Virtual}\right|^2 + \int dPS_3 \left|M_{\text{Real}}\right|^2, \quad (4)$$

که M_{Real}، دامنه تصحیحات حقیقی، که به دو بخش دامنه نرم و دامنه سخت تقسیم می‌شود، $M_{Virtual}$ دامنه تصحیحات مجازی، dPS_2 و dPS_3 به ترتیب دیفرانسیل فضای فاز دو جسمی و سه جسمی می‌باشند:

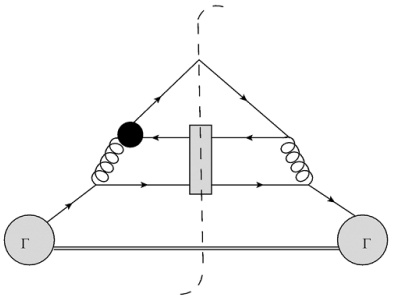
$$dPS_2(\bar{b}(p_2) \to B^+(p) + \bar{u}(k_2)) = \frac{d^3\vec{p}d^3k_2}{(2\pi)^3 4p^0k_2^0}\delta^3(\vec{p}_2 - \vec{k}_2 - \vec{p}) \quad (5)$$

$$dPS_3 = dPS_2 \left.\frac{d^3k}{(2\pi)^3 2k_0}\right|_{k_0<\delta_s} \quad (6)$$

که k چهار تکانه پارتون نرم ظاهر شده در تصحیحات حقیقی است. برای تعیین دامنه تصحیحات مجازی، بایستی همه نمودارهای تک حلقه شامل نمودارهای خود انرژی، سه راسی و چهار راسی، در مجموع 17 نمودار، رسم می‌نماییم و سپس دامنه هریک از آنها را محاسبه می‌کنیم. لازم به ذکر است که دامنه نمودار سمت چپ خط برش را که در بردارنده تصحیحات مجازی می باشد، با دامنه سمت راست خط برش به کمک خطوط ایکونال به هم وصل نموده و در هم ضرب می‌کنیم ، مانند شکل (2)، و سپس مربع دامنه تصحیحات مجازی را بدست می‌آوریم. در نهایت سهم تصحیحات مجازی با انتگرال گیری در فضای فاز دو جسمی را بررسی می‌کنیم. تقریب ایکونال برای محاسبه مربع دامنه تصحیحات حقیقی استفاده می‌شود که با رابطه زیر بیان می‌شود:

$$\left|M_{\text{Real}}\right|^2 = 4\pi\alpha_s \left|M_{LO}\right|^2 \frac{m_1^2}{(k.k_2)^2} \quad (7)$$

پس از قرار دادن مربع دامنه حقیقی در رابطه (4) و انتگرالگیری در فضای فاز سه جسمی، واگرایی‌های مادون قرمز و در نتیجه تکینگی‌های نرم و خطی ظاهر می‌شود. راهکار ما برای محاسبه این انتگرال‌ها و رفع تکینگی‌ها، بهره‌گیری از روش تکه کردن فضای فاز دو برشی نرم δ_s و خطی δ_c می‌باشد [10]. در این روش واگرایی‌های IR توسط یک برش روی انرژی گلئون ساطع شده منظم می‌شوند. اگر انرژی گلئون $\delta_s < k_0$، گلئون سخت نامیده می‌شود و در صورتی که $\delta_s > k_0$ به صورت نرم رفتار می‌کند($\delta_c \ll \delta_s$). در تصحیحات حقیقی، دامنه سخت و نرم ساختار یکسانی دارند. برای ناحیه نرم مقدار $\delta_s = 0.002$ و $\delta_c = 0.01\delta_s$ در نظر گرفته می شود.



شکل 2: نمونه ای از ساختار مربع دامنه تصحیحات مجازی

همچنین به منظور رفع واگرایی‌های مادون قرمز و فرابنفش ظاهر شده در محاسبات از روش منظم سازی ابعادی در $d = 4 - 2\varepsilon$ بعد استفاده شد. جملات نامعین باقیمانده با استفاده از بازبهنجارش حذف می‌شوند. بر طبق قوانین شمارش توان CT، همه واگرایی‌های UV ظاهر شده در قطبش خلا، نمودارهای سه راسی و جعبه (چهار راسی)، با استفاده از واگرایی‌ها در CT [5] حذف می‌شوند. سایر واگرایی‌های مادون قرمز در تصحیحات مجازی با واگرایی های ظاهر شده در تصحیحات حقیقی نیز از بین می‌رود. بعد از رفع همه واگرایی‌ها تابع ترکش معین NLO به صورت زیر بدست می‌آید.

$$D_{NLO}(z) = \frac{c_f\alpha_s}{\pi}\left(\frac{m_u^2}{s_1\beta^2}\right)\left(\beta - \frac{1}{6}\ln\left(\frac{1-\beta}{1+\beta}\right)\right)D_{LO} + \frac{c_f\alpha_s}{2\pi}\left(2 - \frac{3}{2}\left(1 - \frac{1}{\beta^2}\right)\ln\left(\frac{1-\beta}{1+\beta}\right)^2\right)^2 \times \ln\frac{s_1^2}{t_1^2}D_{LO} + \frac{c_f\alpha_s FM^4 s_1}{(2\pi)^4 m_b^6 rz}D_{LO} \times \left((8 - 24\delta_c - 6\ln(1-\delta_c) + 6\ln(1+\delta_c))\right) \quad (8)$$

با استفاده ازروابط (2) و (8) در قضیه عاملبندی، رابطه (1)، نتایج عددی سطح مقطع برای تولید مزون B^+ در این فرایند ترکش در برخورد پروتون-پروتون به شرح زیر حاصل شدند.

محاسبات عددی:

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

نتیجه احتمال ترکش برای مزون B^+ در مقیاس عاملبندی $\mu_F = 2m_u + m_b$ با $m_b = 4.9GeV$ ، $m_u = 0.3GeV$ و با در نظر گرفتن $\langle k_T^2 \rangle = 0.7\text{GeV}$ ، $f_M = 0.48$ GeV و $C_f = \frac{4}{3}$ و $\alpha_s = 0.586$ در معادله (8) عبارت است از:

$$D(z)^{LO} = 0.049$$
$$D(z)^{NLO} = 0.074$$

ما در جدول (1) نتایج سطح مقطع تولید مزون B^+ در LO و NLO را برای مقیاس انرژی $\sqrt{s} = 7TeV$ و در تکانه عرضی بالای $P_T > 5GeV$ و $|y| < 2.4$ بیان کرده‌ایم در جدول (2) نیز نتایج عددی سطح مقطع انتگرالگیری شده با استفاده از توابع ترکش سوزوکی و پیترسون در تقریب LO و برای محدوده انرژی $\sqrt{s} = 1.96TeV$ و در تکانه عرضی بالای $P_T > 6GeV$ و $|y| < 1$ ذکر شده است. داده‌های آزمایشی سطح مقطع دیفرانسیلی کل ، برای تولید مزون B^+ در تکانه های عرضی بالا، مقدار $\sigma_{B^+}^{total} = 28 \pm 7.4 \mu b$ و $\sigma_{B^+}^{total} = 2.4 \pm 0.4 \mu b$ به ترتیب در انرژهای $\sqrt{s} = 7TeV$ و $\sqrt{s} = 1.96TeV$ توسط گروه همکاران CMS گزارش شده است [12و 11]. همانطور که مشاهده می‌شود، در نظر گرفتن تصحیحات در مرتبه دوم اختلالی محاسبات نظری را بهبود می بخشند.

جدول1 : نتایج سطح مقطع $\sigma(\mu b)$کوارک سنگین به مزون B^+ در انرژی Tevatron Run II و LHC

$\sqrt{s}$	LO	NLO
$7TeV$	17.94	22.34
$1.96TeV$	1.72	2.07

جدول2 : نتایج سطح مقطع $\sigma(\mu b)$کوارک $\bar{b}$ به مزون B^+ در انرژی Tevatron Run II در $P_T > 6GeV$ و $|y| < 1$ برای مدل‌های سوزوکی و پیترسون.

σ_{LO}	مدل سوزوکی	مدل پیترسون
B^+	1.66	1.84

به منظور ایجاد پیش بینی های نظری برای سطح مقطع تولید، پکیج Feyncal متمتیکا [13] برای انجام ردهای دیراک و رنگ و پکیج Loop Tools برای حل انتگرال‌های چندگانه استفاده شده است. در کار حاضر از عناصر ماتریسی محاسبه شده توسط Ellis و Sexton [14] بکار گرفته شده و انتگرالگیری از فضای فاز دو جسمی و سه جسمی آنها با استفاده از الگوریتم‌های VEGAS با کدهای فورترنی انجام گرفته است.

نتیجه گیری

ما در این مقاله با استفاده از قضیه عاملبندی، سطح مقطع مقطع تولید مستقیم مزون B^+ در مرتبه NLO را از طریق فرایند ترکش کوارک سنگین $\bar{b}$، در تکانه‌های عرضی بالا برای مقیاس‌های انرژی‌های $\sqrt{s} = 7TeV$ و $\sqrt{s} = 1.96TeV$ محاسبه نمودیم. برای این منظور تصحیحات NLO شامل تحصحیحات حقیقی و مجازی را مطابق مرجع [9و6] در سمت راست فرایند $\bar{b} \to \bar{b}u + \bar{u}$ اعمال نموده‌ایم. نتایج محاسبات عددی ما در مرتبه NLO در محدوده‌ی داده‌های آزمایشی است و به این ترتیب نتایج عددی در مرتبه LO را بهبود می‌بخشد.

مراجع

[1] C. Peterson, D. Schlatter, I. Schmitt, P.M. Zerwas, Phys. Rev. D 27(1), 105 (1983).
[2]. P.D.B. Collins, T.P. Spiller, J.Phys. G Nucl. Phys. 11(12), 1289 (1985).
[3]. M. Suzuki, Phys. Rev. D 33(3), 676 (1986).
[4]. R. Sepahvand, S. Dadfar, Nucl. Phys. A 848(1–2), 218–229 (2010).
[5]. R. Sepahvand, S. Dadfar, Nucl. Phys. A 960, 36–52 (2017)
[6]. R. Sepahvand, S. Dadfar, Phys. Rev. D 95(3), 034012 (2017)
[7].X.C. Zheng, C.H. Chang, X.G. Wu, *Phys. Rev. D 100*(1), 014005
[8]. X.C. Zheng, C.H. Chang, X.G. Wu, T.F. Feng, *Phys. Rev. D, 100*(3), 034004 (2019).
[9] S.Dadfar, S. Zarrin, *EPJ C, 81*(10),1-10.(2019).
[10]. B.W. Harris, J.F. Owens, Phys. Rev. D 65(9), 094032 (2002)
[11]. V. Khachatryan., et al. Phys. Rev. Lett 106, 112001 (2011).
[12]. A. Abulencia, A., et al. *Phys. Rev. D* 75.9 (2007): 092006.
[13] V. Shtabovenko, R. Mertig, F. Orellana, New developments in FeynCalc 9.0. Comput. Phys. Commun. 207, 432–444 (2016).
[14] R.K. Ellis, J.C. Sexton, Nucl. Phys. B 269(2), 445–484 (1986).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی دینامیک درهم‌تنیدگی حالت‌های دوجزئی با استفاده از سنجهٔ هندسی

اشرف‌پور، مهرزاد[۲و۱] ؛ شریفی، شهلا[۱] ؛ افشار، داود[۲و۱]

[۱] گروه فیزیک، دانشکدهٔ علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز

[۲] مرکز تحقیقات لیزر و پلاسما، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز

چکیده

در این مقاله با درنظر گرفتن برهم‌نهی حالت‌های بل، دینامیک درهم‌تنیدگی تحت هامیلتونی XY را بررسی می‌کنیم. به این منظور از سنجهٔ هندسی استفاده کرده و درهم‌تنیدگی حالت‌ها را بر حسب زمان و پارامترهای برهم‌نهی، فاز و جفت شدگی محاسبه می‌کنیم. سپس با رسم نمودارهای مناسب دینامیک درهم‌تنیدگی حالت برهم‌نهی را مورد تجزیه و تحلیل قرار می‌دهیم.

واژه‌های کلیدی: *درهم‌تنیدگی، سنجهٔ هندسی، حالت کوانتومی، دینامیک درهم‌تنیدگی، حالت بل، مدل هایزنبرگ، حالت دوجزئی، برهم‌نهی ، کیوبیت.*

Investigation of Entanglement Dynamics of Bipartite States Using Geometric Measure

Ashrafpour, Mehrzad[1,2]; Sharifi, Shahla[1]; Afshar, Davood[1,2]

[1] *Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz*
[2] *Center for Research on Laser and Plasma, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz*

Abstract

In this paper, assuming the superposition of Bell states, we investingate the dynamics of entanglement under XY Hamiltonian. To this end, using the geometric measure the entanglement of these states, is calculated in terms of time, superposition, phase and spin coupling parameters. Then, we analyze the dynamics of entanglement of the superposition state introduced with appropriate plots.

***Keywords**: entanglement, geometric measure, quantum state, entanglement dynamics, Bell State, Heisenberg model, bipartite, Superposition, qubit*

PACS No. 2

مقدمه

حالت‌های درهم‌تنیده در اطلاعات کوانتومی بسیار پرکاربرد و ارزشمند هستند [۱]. رفتار درهم‌تنیدگی سامانه‌ها در شرایط دینامیکی نیز به شدت مورد توجه پژوهش‌گران قرار گرفته است.

دینامیک سامانهٔ درهم‌تنیده را می‌توان از جنبه‌های مختلفی مورد بررسی قرار داد. یکی از این جنبه‌ها، بررسی انتشار درهم‌تنیدگی از یک نقطه درون یک سامانه در طول زمان است [۲]. سرعت انتشار درهم‌تنیدگی درون سامانه به شرایط و پارامترهای مختلفی هم‌چون حالت اولیهٔ سامانه و شدت جفت شدگی ذرات سامانه وابسته است. ابتدا سامانه در یک وضعیت اولیهٔ معین با هامیلتونی اولیه داده می‌شود و سپس تحولات زمانی آن تحت تغییر پارامترهای مختلفی که می‌تواند باعث ایجاد، افزایش، کاهش، ناپدیدی یا انتقال درهم‌تنیدگی از یک نقطه به نقطهٔ دیگر شود، بررسی می‌گردد. در بسیاری از موارد، سامانه کاملا از حالت اولیهٔ خود دور گشته و یک وضعیت جدید به خود می‌گیرد که این امر تغییرات ناگهانی و چشمگیری در درهم‌تنیدگی سامانه ایجاد می‌کند [۳]. از جمله مدل‌های هامیلتونی که در آن‌ها برهم‌کنش اسپینی مطرح می‌باشد و انتقال اطلاعات کوانتومی توسط زنجیره‌های اسپینی صورت می‌گیرد، مدل‌های اسپینی هایزنبرگ است. دلیل انتخاب مدل یاد شده این است که در بسیاری از سامانه‌های

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

فیزیکی هم‌چون اسپین‌های هسته، نقاط کوانتومی، ابررساناها [٤] و شبکهٔ اپتیکی توسط این مدل شبیه‌سازی شده‌اند [٥].

برای مطالعهٔ دینامیک درهم‌تنیدگی، از سامانه‌های اسپینی کمک می‌گیریم. سامانه‌های اسپینی دوکیوبیتی در دنیای فیزیک کوانتوم، هم از نگاه تئوری و هم از نگاه تجربی مورد توجه است، در آزمایش تجربی بل برای اثبات وجود درهم‌تنیدگی از یک سامانهٔ دو کیوبیتی کمک گرفته شده بود. برای محاسبات دینامیک درهم‌تنیدگی، هم‌چنین برای محاسبات مسئله، اطلاعات در سامانه‌های گرانشی مانند سیاه چاله‌ها البته در چارچوب نظریهٔ میدان‌های گرانشی، سامانه‌های دوکیوبیتی بررسی، ساخته و تحلیل می‌شوند [٨]. با توجه به اینکه می‌خواهیم تغییرات درهم‌تنیدگی را مطالعه کنیم، بهتر است نسبت به یک مرجع این مطالعه را انجام دهیم. پس حالت‌هایی را انتخاب می‌کنیم که، قبل از وارد کردن تغییرات به سامانهٔ شامل این حالت‌ها، در بیشینهٔ میزان درهم‌تنیدگی قرار داشته باشند. سامانه‌های دوکیوبیتی که در بیشینهٔ میزان درهم‌تنیدگی قرار داشته باشند، تحت چارچوبی که بل مشخص کرده، فرمول‌بندی شده‌اند و به حالت‌های بل یا جفت ذره‌های EPR در نظریهٔ اطلاعات کوانتومی معروف هستند [٩].

سنجه‌های مختلفی نیز برای کمی کردن میزان درهم‌تنیدگی این حالت‌ها وجود دارد [١٠]. از میان سنجه‌های درهم‌تنیدگی، سنجهٔ هندسی را برای سنجش میزان درهم‌تنیدگی استفاده می‌کنیم. سنجهٔ هندسی به صورت کمترین فاصلهٔ حالت درهم‌تنیدهٔ مفروض با مجموعهٔ حالت‌های جدایی‌پذیر تعریف می‌شود. در اصل سنجهٔ هندسی از طریق محاسبهٔ زاویهٔ بین حالت درهم‌تنیده و نزدیک‌ترین حالت جدایی‌پذیر میزان درهم‌تنیدگی حالت کوانتومی خالص را اندازه می‌گیرد [١١].

معرفی سنجهٔ هندسی و مدل مورد استفاده

حالت خالص درهم‌تنیدهٔ n جزئی که هر جزء آن می‌تواند فضای هیلبرت مجزایی داشته باشد به صورت زیر معرفی می‌شود:

$$|\psi\rangle=\sum_{p_1p_2\dots p_n}\chi_{p_1p_2\dots p_n}\left|e^{(1)}_{p_1}e^{(2)}_{p_2}\dots e^{(n)}_{p_n}\right\rangle \qquad (١)$$

برای درهم‌تنیدگی با استفاده از فاصلهٔ میان حالت درهم‌تنیدهٔ $|\psi\rangle$ و نزدیک‌ترین حالت خالص جداپذیر n جزئی اختیاری می‌توان تعریف هندسی زیر را ارائه داد:

$$d=\min_{|\phi\rangle}\ \||\psi\rangle-|\phi\rangle\| \qquad (٢)$$

که در آن $|\phi\rangle$ نزدیک‌ترین حالت جداپذیر است. در ادامه برای حالت $|\phi\rangle$ به مسئلهٔ ویژه‌مقداری غیرخطی مستقل از انتخاب پایه‌ها به صورت زیر خواهیم رسید [١١]:

$$\langle\psi|\left(\otimes^n_{j(\neq i)}|\phi^{(j)}\rangle\right)=\Lambda\langle\phi^{(i)}|,\left(\otimes^n_{j(\neq i)}\langle\phi^{(j)}|\right)|\psi\rangle=\Lambda|\phi^{(i)}\rangle \qquad (٣)$$

که در آن ویژه‌مقدار Λ، (مرتبط با ضرایب لاگرانژ با قید $\langle\phi|\phi\rangle=1$) حقیقی و مستقل از انتخاب پایه‌های مکانی بوده و در بازهٔ [-1,1] قرار دارند. ازاین‌رو، طیف ویژه مقادیر Λ می‌تواند به‌عنوان کسینوس زاویهٔ میان $|\psi\rangle$ و $|\phi\rangle$ تعبیر گردد. با محاسبهٔ ویژه‌مقدار درهم‌تنیدگی Λ_{max}، که متناظر با نزدیک‌ترین حالت جداپذیر است، سنجهٔ هندسی درهم‌تنیدگی به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$E_{sin^2}(\psi)=1-\Lambda^2_{max} \qquad (٤)$$

برای حالت‌های دوجزئی کیوبیتی کاملا درهم‌تنیده حداکثر سنجهٔ هندسی ۰/۵ و برای حالت‌های جداپذیر صفر است.

مدل XY ناهمسانگرد هایزنبرگ که در آن $J_x \neq J_y$ و $J_z=0$ است، برای سامانهٔ n کیوبیتی به‌صورت زیر داده می‌شود [١٢]:

$$H=\sum^n_{i=1}\left(J_x S^x_i S^x_{i+1}+J_y S^y_i S^y_{i+1}\right) \qquad (٥)$$

که در آن J_x و J_y ضریب جفت‌شدگی و S^α_i عملگرهای اسپینی هستند که $S^\alpha_i=\frac{1}{2}\sigma^\alpha_i$ که در آن $i=1,2$ و $\alpha=x,y,z$ است.

بررسی درهم‌تنیدگی برهم‌نهی حالت‌های بل

برهم‌نهی از حالت‌های بل $|\psi_{00}\rangle$ و $|\psi_{01}\rangle$ را به‌صورت زیر تشکیل می‌دهیم:

$$|\psi\rangle=\sqrt{P}\,|\psi_{01}\rangle+e^{i\phi}\sqrt{1-P}\,|\psi_{00}\rangle \qquad (٦)$$

که در آن داریم:

$$|\psi\rangle=\sqrt{P}\left(\frac{|01\rangle+|10\rangle}{\sqrt{2}}\right)+e^{i\phi}\sqrt{1-P}\left(\frac{|00\rangle+|11\rangle}{\sqrt{2}}\right) \qquad (٧)$$

حالت $|\psi\rangle$ با عملگر یکانی تحول زمانی e^{-iHt} به‌صورت e^{-iHt} متحول می‌شود. این تحول تحت تأثیر هامیلتونی H است.

هامیلتونی مدل XY برای سامانهٔ دو کیوبیتی معرفی شده در این کار با استفاده از رابطهٔ (٥) به صورت نوشته می‌شود.

$$H=J_x(S^x_1\otimes S^x_2)+J_y(S^y_1\otimes S^y_2) \qquad (٨)$$

با استفاده از پایه‌های فضای هیلبرت حالت معرفی شده نمایش ماتریسی هامیلتونی به‌صورت زیر به دست می‌آید:

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

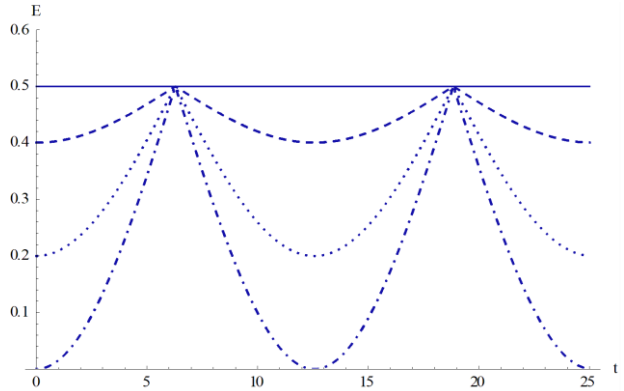
$$H=\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \frac{J_x-J_y}{2} \\ 0 & 0 & \frac{J_x+J_y}{2} & 0 \\ 0 & \frac{J_x+J_y}{2} & 0 & 0 \\ \frac{J_x-J_y}{2} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (۹)$$

اکنون میزان درهم‌تنیدگی برای سامانه‌ای که از برهم‌نهی دو حالت بل که تحت هامیلتونی مدل XY متحول می‌شود را بررسی می‌کنیم. حالت معرفی شده در رابطه (٦) بعد از تحول زمانی تحت هامیلتونی H می‌شود:

$$|\psi,t\rangle = e^{-iHt}|\psi\rangle \quad (۱۰)$$

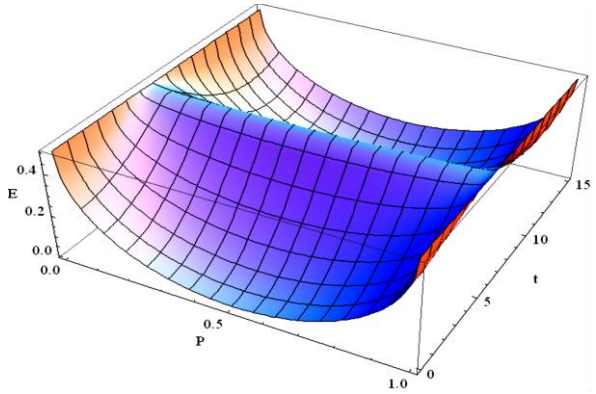
در نهایت با استفاده از سنجهٔ هندسی تحول زمانی درهم‌تنیدگی این حالت را به ازاء متغیرهای آن مورد بررسی قرار می‌دهیم.

شکل(۱)، نمودار تغییرات سنجهٔ هندسی برحسب t، به ازاء چند مقدار مختلف پارامتر برهم‌نهی P و اختلاف فاز ثابت $\phi=\pi$ رسم شده است. مطابق شکل تغییرات درهم‌تنیدگی حالت معرفی شده به‌صورت تابعی نوسانی از زمان است. مطابق انتظارمان برای P=0,1 مقدار درهم‌تنیدگی برای این برهم‌نهی در طول زمان، ثابت و برابر مقدار بیشینهٔ سنجهٔ هندسی یعنی ۰/۵ است. در ابتدای تحول برای $P=\frac{1}{2}$ مقدار درهم‌تنیدگی صفر شده، زیرا حالت $|\psi\rangle$ به یک حالت جداپذیر تبدیل شده است. با افزایش زمان، مقدار درهم‌تنیدگی با دورهٔ تناوب منظمی نوسان می‌کند و به مقدار بیشینهٔ ۰/۵ می‌رسد. حالت معرفی شده در این کار برای P=0.01 و P=0.1 همان‌طور که در شکل (۱) دیده می‌شود در طول زمان، همواره درهم‌تنیده بوده و بیشینه‌ها و دورهٔ تناوب یکسان دارند.



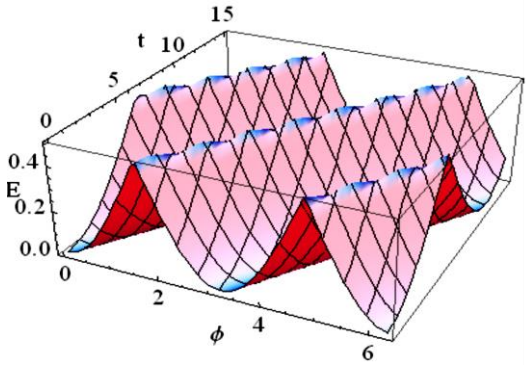
شکل ۱: تغییرات سنجهٔ هندسی به ازاء چند P مختلف (از بالا P=1,0 خط توپر؛ P=0.01 خط‌چین؛ P=0.1 نقطه‌چین؛ P=0.5 خط‌چین نقطه)

در شکل (۲) نمودار تغییرات سنجهٔ هندسی برحسب t و P رسم شده است. به ازاء P=0 و P=1 بیشینهٔ مقدار سنجهٔ هندسی برای این برهم‌نهی در طول زمان، بیشینهٔ مقدار یعنی ۰/۵ و در $P=\frac{1}{2}$ کمینهٔ مقدار صفر بدست می‌آید.



شکل۲: تغییرات سنجهٔ هندسی به ازاء $\phi=\pi$, $J_y=0.5$, $J_x=0.1$ برحسب t و P

تغییرات سنجهٔ هندسی برحسب t و ϕ در شکل (۳) رسم شده است. به‌ازاء 2π و π و $\phi=0$، مقدار سنجهٔ هندسی در آغاز زمان صفر و حالت‌ها جداپذیر هستند، اما با گذشت زمان به مقدار بیشینه رسیده و به‌صورت تناوبی تغییر می‌کند. همچنین به ازاء $\phi=\frac{\pi}{2}$ و $\frac{3\pi}{2}$ مقدار سنجهٔ هندسی بیشینه است و با گذشت زمان مقدار آن با دورهٔ تناوب منظمی نوسان می‌کند.

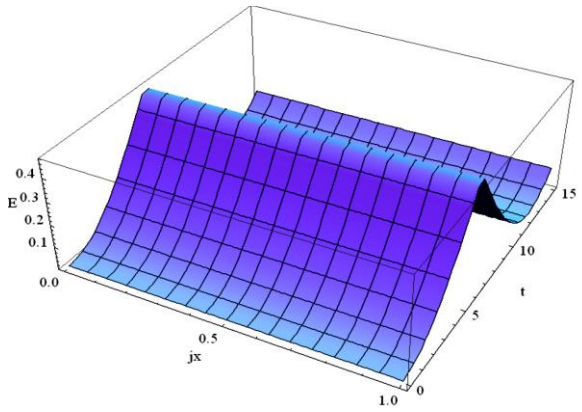


شکل۳: تغییرات سنجهٔ هندسی به ازاء P=0.4, $J_y=0.5$, $J_x=0.1$ برحسب t و ϕ

در ادامه برای بررسی تأثیر ضرائب برهم‌کنش در دینامیک درهم‌تنیدگی حالت معرفی شده در این کار، چگونگی تغییرات سنجهٔ هندسی برحسب t و J_x را در شکل (٤) رسم کرده‌ایم. مشاهده می‌شود تغییرات سنجهٔ هندسی تابعی نوسانی از زمان است

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

و به ازاء تمامی مقادیر J_x در شروع تحول مقدار سنجهٔ هندسی صفر خواهد بود و با گذشت زمان به بیشینهٔ مقدار یعنی ۰/۵ می‌رسد.



شکل٤: تغییرات سنجهٔ هندسی برای $\phi=\pi$, $J_y=0.5$, $P=0.4$ برحسب t و J_x

نتیجه‌گیری

در این کار تحول زمانی سنجهٔ هندسی درهم‌تنیدگی سامانه‌های دو جزئی تحت هامیلتونی XY بررسی شد. بررسی شکل‌ها نشان می‌دهند که درهم‌تنیدگی حالت معرفی شده با زمان تحت تأثیر پارامترهای موثر تغییر می‌کند. مطابق با انتظارمان بیشترین مقدار درهم‌تنیدگی برای حالت‌های بل هنگامی‌که $P=0,1$ است بدست می‌آید و با گذر زمان درهم‌تنیدگی آن بیشینه باقی می‌ماند. هم‌چنین با بررسی دینامیک درهم‌تنیدگی حالت معرفی شده بر حسب پارامتر ϕ مشاهده می‌شود که به ازاء مقادیر صحیحی از π ($\phi=n\pi$) درهم‌تنیدگی در آغاز زمان صفر بوده و با گذشت زمان به‌صورت نوسانی بیشینه می‌شود. به ازاء $\phi=n\frac{\pi}{2}$ درهم‌تنیدگی در آغاز زمان بیشینه بوده و با گذشت زمان به‌صورت نوسانی به کمینهٔ مقدار خود می‌رسد. در تمامی بررسی‌های انجام گرفته به ازاء پارامترهای مؤثر در حالت معرفی شده در این کار بیشینهٔ مقدار سنجهٔ هندسی درهم‌تنیدگی برای حالت‌های دوجزئی در طول زمان مقدار ۰/۵ به‌دست آمد، یعنی با توجه به مدل مورد استفاده، درهم‌تنیدگی حالت معرفی شده تغییر کرده اما هم‌چنان برای مقادیر مشخصی از این پارامترها مقدار بیشینهٔ ۰/۵ را تکرار می‌کند.

مرجع‌ها

[1] D. Mc Mahon; "*Quantum Computing Explained*"; John Wiley and Sons Publication. (2007) 86-107
[2] L. Amico, A. Osterloh, "Dynamics of Entanglement in One-Dimensional Spin Systems", Phys. Rev. A **69**, 022304 (2003).
[3] C. F. Roos, M. Riebe, H. Häffner, W. Hänsel, J. Benhelm, G. P. Lancaster, ... and R. Blatt, "Control and measurement of three-qubit entangled states," science, 304(5676), 1478-1480 (2004).
[4] S. Chakravarty, B. I. Halperin and D. R. Nelson, "Two-dimentional Quantum Heisenberg Antifromagnet at low Temperatures" Phys.Rev B.39,2344 (1989).
[5] A. K. Ekert. Phys. Rev. Lett. **67**.661 (1991).
[6] M. Neeley, R. C. Bialczak, M. Lenander, E. Lucero, M. O. Mariantoni, A. D. connell, ... and Y.Yin, "Generation of three-qubit entangled states using superconducting phase qubits," Nature, 467(7315), 570 (2010).
[7] C. H. Bennett, D. P. Divincenzo, J. A. Smolin and W. K. Wootters., "Mixed-state entanglement and quantum error correction," Phys. Rev. A. 54 3824 (1996).
[8] M. B. Plenio and S. Virmani; "An Introduction to Entanglement Measures"; *Quantum Information and Computation* **7**, (2007) 1-57.
[9] T.-C. Wei and P. M. Goldbart; "Geometric Measure of Entanglement and Applications to Bipartite and Multipartite Quantum States"; *Physical Review A* **68**, No. 042307 (2003).
[10] A. Deger and T. Wei., "Geometric entanglement and quantum phase transition in generalized cluster-XY models," Quantum Information Processing (2019).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

اثر جفت‌شدگی مگنون-کیوبیت بر درهم‌تنیدگی مگنون با کیوبیت ابررسانا در یک کاواک اپتیکی اتلاف‌گر

ستوده خیرآبادی، میثم؛ توسلی، محمدکاظم

گروه اپتیک و لیزر، دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد

چکیده

در این مقاله تولید درهم‌تنیدگی بین مگنون و کیوبیت ابررسانا با در نظر گرفتن جفت‌شدگی مگنون-کیوبیت در یک کاواک اپتیکی اتلاف‌گرِ تک‌مُد بررسی شده است. ابتدا هامیلتونی سامانه با در نظر گرفتن تقریب موج چرخان معرفی و سپس در تصویر برهم‌کنش محاسبه شده و در نهایت با در نظر گرفتنِ نامیزانی‌های مناسب بین بسامدهای اجزای سامانه، هامیلتونی موثر بدست آمده است. هم‌چنین، برای داشتن توصیفی واقعی‌تر از سامانه، اتلاف فوتونی با رویکرد پدیده شناسانه در نظر گرفته شده است. سپس با انتخاب دو حالت اولیه مختلف و با استفاده از معادله شرودینگر، کِت حالت وابسته به زمان سامانه بدست آمده است. محاسبه سنجه تلاقی برای ارزیابی میزان درهم‌تنیدگی بین مگنون و کیوبیت ابررسانا به ازای پارامترهای مختلف نشان می‌دهد که افزایش میزان جفت‌شدگی مگنون-کیوبیت به افزایش مقدار و نوسانات درهم‌تنیدگی منجر می‌شود. علاوه بر این، با انتخاب یک کاواک با ضریب کیفیت بالا (نشت فوتونی قابل صرف‌نظر) و برابر قرار دادن جفت‌شدگی‌های مگنون-کیوبیت و میدان-کیوبیت با جفت‌شدگی میدان-مگنون، بیشینه درهم‌تنیدگی در زمان‌هایی قابل دسترس است.

واژه های کلیدی: *درهم‌تنیدگی مگنون-کیوبیت، سامانه‌های مگنونی، کاواک اپتیکی اتلاف‌گر.*

The effect of magnon-qubit coupling on the entanglement of magnon with superconducting qubit in a dissipative optical cavity

Setodeh Kheirabady, Meysam; Tavassoly, Mohammad Kazem

Optics and Laser Group, Faculty of Physics, Yazd University

Abstract

In this paper, the generation of the entanglement between magnon and superconducting qubit by considering magnon-qubit coupling in a dissipative single-mode optical cavity has been investigated. At first, the system's Hamiltonian in the rotating wave approximation and then in the interaction picture is calculated, and finally, by considering appropriate detunings between system component's frequencies, the effective Hamiltonian has been obtained. Also, to have a more realistic description of the system, photonic dissipation is considered with a phenomenological approach. Then, by choosing two different initial states and by using the Schrödinger equation, the time-dependent state ket of the system has been obtained. Calculating concurrence to evaluate the amount of entanglement between magnon and superconducting qubit with different parameters shows that increasing magnon-qubit coupling leads to raising the amounts and fluctuations in entanglement. Furthermore, with the choice of a cavity with a high Q factor (negligible photonic leakage) and equalizing the magnon-qubit and field-qubit couplings with field-magnon coupling, the maximal entanglement is achievable at times.

Keywords: *Dissipative optical cavity, Magnonic systems, Magnon-qubit entanglement.*

PACS No. *32*

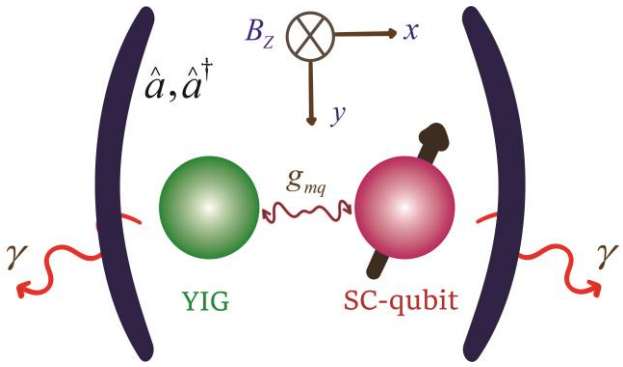
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مقدمه

درهم‌تنیدگی‌های ماکروسکوپی در سامانه‌های پیچیده کوانتومی به دلیل ویژگی‌های منحصر به فردی که دارند، بخش مهمی از فرآیندهای اطلاعات کوانتومی و هم‌چنین رمزنگاری کوانتومی هستند [۱]. در بیشتر سامانه‌های کوانتومی، اتلاف اثر مخربی بر ویژگی‌های کوانتومی سامانه مورد مطالعه دارد، بنابراین ایجاد سامانه‌های مقاوم در برابر اتلاف و اثرات محیطی همواره بخش مهمی از مطالعات تجربی و نظری را به خود اختصاص داده است. در این رابطه استفاده از سامانه‌های کوانتومی ماکروسکوپی یکی از گزینه‌های مناسب برای غلبه بر اثرات محیطی و اتلاف است [۲]. به عنوان مثال ماده فرومغناطیسِ ساخته شده از ایتریوم، آهن و گارنت (ترکیبی از سیلیکات‌ها)، که مگنون (YIG) خوانده می‌شود به واسطه رفتار مشابه اسپینِ آن‌ها (دوترازه بودن) امروزه بسیار مورد توجه پژوهشگران قرار گرفته‌اند [۳]. از دیگر ویژگی‌های منحصر به فرد مگنون‌ها می‌توان به نیمه‌عمر بالا و قابلیت تنظیم‌پذیری بالای آن‌ها اشاره کرد [٤]، که هر دو ویژگی مورد نیاز فیزیک تجربی می‌باشد. هم‌چنین، مگنون‌ها توانایی تبادل همدوسِ اطلاعات کوانتومی با دیگر کاندیداهای بیت‌های کوانتومی مانند فوتون‌ها و یا کیوبیت‌های ابررسانا را دارند [۵]. اخیراً جفت‌شدگی بین مگنون و کیوبیت ابررسانا بسیار مورد توجه قرار گرفته است. در این زمینه، در مرجع [٦] نویسندگان با در نظر گرفتن جفت‌شدگی مگنون-کیوبیت به بررسی پدیده گیراندازی مگنونی پرداخته‌اند. ما در این مقاله درهم‌تنیدگی بین مگنون با یک کیوبیت ابررسانا در یک کاواک اپتیکی اتلاف‌گر را با در نظر گرفتن جفت‌شدگی مگنون-کیوبیت بررسی کرده‌ایم.

مدل سامانه و اندازه‌گیری درهم‌تنیدگی

سامانه مورد مطالعه در این پژوهش از یک کاواک اپتیکی اتلاف‌گرِ تک‌مُد با بسامد ω_c تشکیل شده است که این کاواک اپتیکی، شامل یک کیوبیت ابررسانا و هم‌چنین یک مگنون می‌باشد. مدل درنظر گرفته شده در شکل ۱ نمایش داده شده است. هامیلتونی مگنون در حضور یک میدان مغناطیسی با رابطه $\hat{H}_m = g\mu_B B_z \hat{S}_z$ مشخص می‌شود که در این رابطه g ثابت ژیرومغناطیس، μ_B مگنتون بوهر، $\hat{S}_z$ و B_z به ترتیب مولفه z اسپینِ مگنون و میدان مغناطیسی می‌باشند. هم‌چنین، با استفاده از تبدیل هولشتاین-پریماکوف [۷] می‌توان $\hat{H}_m$ را با عملگرهای بوزونی $\hat{m}$ و $\hat{m}^\dagger$ به صورت $\hat{H}_m = \omega_m \hat{m}^\dagger \hat{m}$ نوشت که ω_m بسامد مگنون است.



شکل ۱: کاواک اپتیکی اتلاف‌گرِ تک‌مُد شامل یک مگنون و یک کیوبیت ابررسانا.

هامیلتونی برهم‌کنش یک مگنون با میدان کوانتیده تک‌مُد با ضریب جفت‌شدگی g_m با رابطه زیر معرفی می‌شود ($\hbar = 1$) [۷]:

$$\hat{H}_{am} = g_m \left(\hat{m}^\dagger \hat{a} + \hat{m} \hat{a}^\dagger \right). \quad (۱)$$

برهم‌کنش بین کیوبیت ابررسانا (با بسامد ω_q) با میدان کوانتیده تک‌مُد و برهم‌کنش مگنون با کیوبیت ابررسانا به ترتیب با ضریب‌های جفت‌شدگی g_q و g_{mq} با روابط زیر تعیین می‌شوند:

$$\hat{H}_{aq} = g_q \left(\hat{a}\hat{\sigma}_+ + \hat{a}^\dagger \hat{\sigma}_- \right), \quad \hat{H}_{mq} = g_{mq} \left(\hat{\sigma}_+ \hat{m} + \hat{\sigma}_- \hat{m}^\dagger \right). \quad (۲)$$

به این ترتیب هامیلتونی کلِ سامانه در تقریب موج چرخان به صورت زیر معرفی می‌شود:

$$\hat{H}_{total} = \omega_c \hat{a}^\dagger \hat{a} + \omega_m \hat{m}^\dagger \hat{m} + \frac{\omega_q}{2} \hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_- + \sum_{\lambda = am, aq, mq} \hat{H}_\lambda. \quad (۳)$$

حال با در نظر گرفتن یک تبدیل یکانی به صورت $\hat{R}(t) = e^{i\hat{H}_0 t}$ که $\hat{H}_0 = \omega_c \hat{a}^\dagger \hat{a} + \omega_m \hat{m}^\dagger \hat{m} + \frac{\omega_q}{2} \hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_-$ و هم‌چنین با در نظر گرفتن شرایط تشدید بین مگنون و میدانِ کاواک ($\omega_c = \omega_m$) و نیز با برقراری رابطه $\omega_{c(m)} - \omega_q = \delta$، هامیلتونی سامانه به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\hat{H}_I = \left(g_m \hat{a} \hat{m}^\dagger + \left[g_q \hat{a} + g_{mq} \hat{m} \right] \hat{\sigma}_+ e^{-i\delta t} \right) + H.c. \quad (٤)$$

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

اکنون به کمک روش ارائه شده در مرجع [۸] (که coarse-grained نام دارد) و با در نظر گرفتن شرایط و نسبت‌ها برای جفت‌شدگی‌های موجود در سامانه به صورتِ $\delta = g_m$، $g_q = \alpha g_m$، $g_{mq} = \xi g_m$ می‌توان هامیلتونی موثر سامانه را محاسبه کرد. برای بررسی واقعی‌تر سامانه، جمله $-i\gamma\hat{a}^\dagger\hat{a}$ که مربوط به اتلاف از دیواره‌های کاواک است را با رویکرد پدیده‌شناسانه به هامیلتونی موثر اضافه می‌کنیم. بنابراین هامیلتونی موثر نهایی سامانه با رابطه زیر مشخص می‌شود:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{eff} &= g_m(\hat{a}\hat{m}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{m}) - \alpha^2 g_m(\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-) \\ &\quad - \xi^2 g_m(\hat{m}^\dagger\hat{m}\hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-) \\ &\quad - \alpha\xi g_m(\hat{m}\hat{a}^\dagger + \hat{m}^\dagger\hat{a})\hat{\sigma}_z - i\gamma\hat{a}^\dagger\hat{a}.\end{aligned} \quad (۵)$$

برای انتخاب پایه‌های مناسب، پایستگی عدد برانگیختگی کلِ سامانه را بررسی می‌کنیم. عملگر تعداد کل با رابطه $\hat{N} = \sum_{\hat{n}=\hat{a},\hat{m},\hat{q}} \hat{n}^\dagger\hat{n}$ مشخص می‌شود که به سادگی می‌توان نشان داد جابجایی $\hat{N}$ و $\hat{H}_{eff}$ صفر می‌شود که این به معنای پایستگی عدد برانگیختگی کل است. بنابراین مجموعه پایه‌های سه‌جزئی انتخابی سامانه را به صورتِ زیر در نظر می‌گیریم:

$$\begin{aligned}&\{|cavity, magnon, qubit\rangle\} \equiv \\ &\{|n+1,0,g\rangle,\ |n,1,g\rangle,\ |n,0,e\rangle,\ |n-1,1,e\rangle\}.\end{aligned} \quad (۶)$$

با توجه به پایه‌های انتخابی، کت حالتِ وابسته به زمانِ سامانه را به صورت زیر معرفی می‌کنیم:

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle &= c_1(t)|n+1,0,g\rangle + c_2(t)|n,1,g\rangle \\ &\quad + c_3(t)|n,0,e\rangle + c_4(t)|n-1,1,e\rangle.\end{aligned} \quad (۷)$$

با در نظر گرفتن حالت اولیه بهنجار سامانه به صورتِ:

$$\begin{aligned}|\psi(0)\rangle &= a_1|n+1,0,g\rangle + a_2|n,1,g\rangle \\ &\quad + a_3|n,0,e\rangle + a_4|n-1,1,e\rangle,\ \ \sum_{i=1}^{4}|a_i|^2 = 1.\end{aligned} \quad (۸)$$

و به کمک معادله شرودینگر وابسته به زمان ($\hat{H}_{eff}|\psi(t)\rangle = i\partial_t|\psi(t)\rangle$) می‌توان ضرایب وابسته به زمان در رابطه (۷) را بدست آورد که بدلیل بزرگ و پیچیده بودن روابط از بیان شکل صریح آن‌ها صرف‌نظر می‌کنیم.

با استفاده از $|\psi(t)\rangle$ عملگر چگالی سامانه را می‌توان نوشت:

$$\hat{\rho} = \frac{|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|}{Tr(|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|)}. \quad (۹)$$

با رَدگیری مناسب و استفاده از پایه‌های معرفی شده در (۶) می‌توان ماتریس چگالی کاهش‌یافته برای مگنون و کیوبیت ($\hat{\rho}_{mq}$) را به صورت زیر بدست آورد:

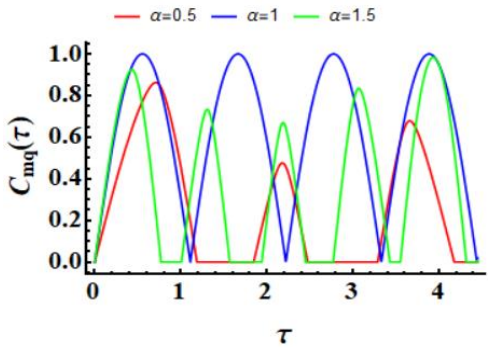
$$\hat{\rho}_{mq} = \begin{pmatrix} |c_4|^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & |c_3|^2 & c_3c_2^* & 0 \\ 0 & c_2c_3^* & |c_2|^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & |c_1|^2 \end{pmatrix}. \quad (۱۰)$$

حال می‌خواهیم با استفاده از ماتریس چگالی دوجزئی بدست آمده در رابطه (۱۰) و محاسبه سنجه تلاقی، میزان درهم‌تنیدگی بین مگنون و کیوبیت ابررسانا را ارزیابی کنیم. با استفاده از ویژه مقادیر ماتریسِ $\hat{\rho}_{mq}(\hat{\sigma}_y\otimes\hat{\sigma}_y)\hat{\rho}_{mq}^*(\hat{\sigma}_y\otimes\hat{\sigma}_y)$ (که $\hat{\sigma}_y$ ماتریس پائولی است) سنجه تلاقی به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$C(t) = Max\left(0, \sqrt{\ell_1} - \sqrt{\ell_2} - \sqrt{\ell_3} - \sqrt{\ell_4}\right), \quad (۱۱)$$

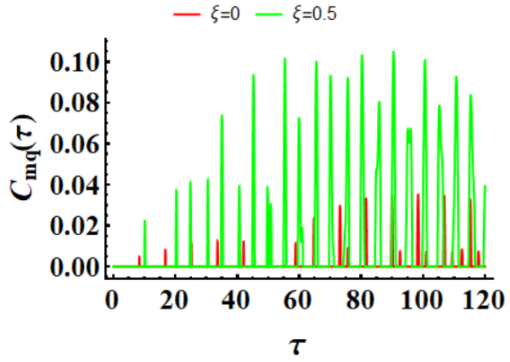
که در این رابطه $\ell_i (i=1,\cdots,4)$ ویژه‌مقادیر ماتریس معرفی شده هستند که در رابطه (۱۱) به‌ترتیب کاهشی نوشته شده‌اند.

در ادامه نمودارهای سنجه تلاقی برحسب زمان مقیاس‌شده $\tau = g_m t$ برای درهم‌تنیدگی بین مگنون و کیوبیت ابررسانا به ازای حالتِ اولیه $n=1,\ a_{i=1,\cdots,4} = 1/\sqrt{4}$ در شکل‌های ۳، ٤، ۵ و به ازای حالتِ اولیه $n=1,\ a_{i=1,3} = 1/\sqrt{2},\ a_{i=2,4} = 0$ در شکل‌های ۲، ٦ رسم شده است.

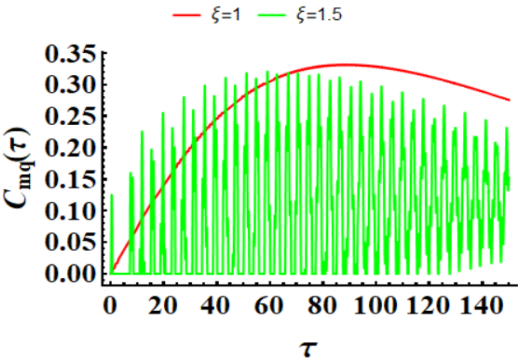


شکل ۲: درهم‌تنیدگی مگنون-کیوبیت به ازای $\gamma = 0, \xi = 1$.

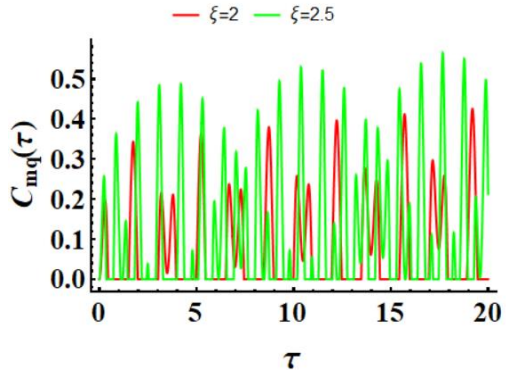
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.



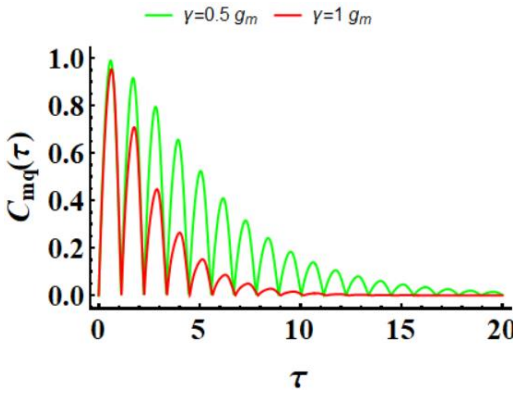
شکل ۳: درهم‌تنیدگی مگنون-کیوبیت به ازای $\alpha=1,\gamma=0.015g_m$.



شکل ٤: درهم‌تنیدگی مگنون-کیوبیت به ازای $\alpha=1,\gamma=0.015g_m$.



شکل ٥: درهم‌تنیدگی مگنون-کیوبیت به ازای $\alpha=1,\gamma=0.015g_m$.



شکل ٦: درهم‌تنیدگی مگنون-کیوبیت به ازای $\alpha=\xi=1$.

بحث و نتیجه‌گیری

در این بخش به تجزیه و تحلیل نتایج عددی می‌پردازیم. شکل ۲ با حذف اثر اتلاف فوتونی برای بررسی اثر جفت‌شدگی کیوبیت-میدان ($g_q=\alpha g_m$) بر درهم‌تنیدگی مگنون با کیوبیت رسم شده است. در این شکل مشاهده می‌شود که به ازای $\alpha=1$ بیشینه درهم‌تنیدگی در لحظه‌هایی از زمان قابل دسترس می‌باشد. شکل‌های ۳ تا ۵ درهم‌تنیدگی مگنون با کیوبیت را به ازای مقادیر مختلف جفت‌شدگی مگنون-کیوبیت ($g_{mq}=\xi g_m$) را نشان می‌دهد. در شکل ۳ با $\xi=0$ شاهد مرگ و احیای درهم‌تنیدگی در لحظاتی از زمان و نیز ظهور نوساناتی هستیم که تعداد این نوسانات و هم‌چنین میزان درهم‌تنیدگی با افزایش میزان ξ افزایش می‌یابد. با برابر شدن جفت‌شدگی‌های مگنون-کیوبیت و مگنون-میدان ($\xi=1$) در شکل ٤، مرگ درهم‌تنیدگی در بازه زمانی در نظر گرفته شده مشاهده نمی‌شود. با مقایسه شکل‌های ٤ و ٥ مشاهده می‌کنیم که با افزایش دوباره ξ میزان درهم‌تنیدگی و هم‌چنین نوسانات آن افزایش می‌یابد. برای بررسی اثر اتلاف فوتونی، شکل ٦ به ازای دو مقدار متفاوت γ رسم شده است، که نشان‌دهنده نقش مخرب اتلاف بر میزان درهم‌تنیدگی می‌باشد. بنابراین نتیجه می‌گیریم که با انتخاب یک کاواک با ضریب کیفیت بالا و تنظیم مناسب ضریب‌های جفت‌شدگی، بیشینه درهم‌تنیدگی مگنون با کیوبیت در لحظاتی از زمان قابل دسترس می‌باشد و تقریبا در همه موارد ارائه شده مرگ و احیای درهم‌تنیدگی اتفاق می‌افتد.

مرجع‌ها

[۱] M. A. Nielsen, I. L. Chuang; "Quantum Computation and Quantum Information"; 2th edition, Cambridge University Press. (2000)
[۲] B. Julsgaard, A. Kozhekin, E. S. Polzik; "Experimental long-lived entanglement of two macroscopic objects"; *Nature* **413**, (2001) 400.
[۳] Y. Tabuchi, S. Ishino, T. Ishikawa, R. Yamazaki, K. Usami, Y. Nakamura; "Hybridizing ferromagnetic magnons and microwave photons in the quantum limit"; *Phys. Rev. Lett.* **113**, (2014) 083603.
[۴] X. Zhang, C. L. Zou, L. Jiang, H. X. Tang; "Cavity magnomechanics"; *Sci. Adv.* **2**, (2016) e1501286.
[۵] O. O. Soykal, M. E. Flatté; "Strong field interactions between a nanomagnet and a photonic cavity"; *Phys. Rev. Lett.* **104**, (2010) 077202.
[۶] Z. X. Liu, H. Xiong, Y. Wu; "Magnon blockade in a hybrid ferromagnet-superconductor quantum system"; *Phys. Rev. B* **100**, (2019) 134421.
[۷] T. Holstein, H. Primakoff; "Field dependence of the intrinsic domain magnetization of a ferromagnet"; *Phys. Rev.* **58**, (1940) 1098.
[۸] D. F. James, J. Jerke; "Effective Hamiltonian theory and its applications in quantum information"; *Can. J. Phys.* **85**, (2007) 625.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

دینامیک ناسازگاری کوانتومی دو کیوبیت متحرک در یک مخزن مشترک

تقی‌پور ، جواد[۱] ؛ مجاوری ، بشیر[۱] ؛ دهقانی ، علیرضا[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه شهید مدنی آذربایجان، تبریز

[۲] گروه فیزیک، دانشگاه پیام‌نور، تبریز

چکیده

در این مقاله دینامیک ناسازگاری کوانتومی بین دو اتم متحرک در داخل یک کاواک نشتی که از طریق برهم‌کنش دوقطبی _ دوقطبی به هم جفت شده‌اند را مطالعه می‌کنیم. نشان خواهیم داد که هم در رژیم مارکوفی و هم در رژیم غیرمارکوفی شدت کوپلاژ نسبی، سرعت کیوبیت‌ها و برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی بین کیوبیت‌ها تأثیرات چشم‌گیری در حفظ ناسازگاری کوانتومی سامانه دارند.

واژه های کلیدی: *ناسازگاری کوانتومی، حرکت اتمی، رژیم مارکوفی و غیرمارکوفی.*

Quantum discord dynamics of two moving qubits in a common reservior

Taghipour, Javad[1]; Mojaveri, Bashir[1] ; Dehghani, Alireza[2]

[1] *Department of Physics, Azarbaijan Shahid Madani University, Tabriz*
[2] *Department of Physics, Peyamenur University, Tabriz*

Abstract

In this paper, we study the dynamics of quantum discord between two moving atoms coupled by dipole-dipole interaction within a leaky cavity . We show that in both the Markovian and non-Markovian regimes the relative coupling constant, the velocities of the qubits, and the dipole-dipole interaction between the qubits have significant effects on maintaining the quantum discord of the system.

***Keywords**: Quantum discord, Atomic motion, Markovian and non_Markovian regime*

PACS No. 30

مقدمه

همبستگی‌های کوانتومی به دلیل نقش مهمی که در علم اطلاعات کوانتومی ایفا می‌کنند، به حوزه‌ای مورد علاقه جهت پژوهش‌های بیشتر تبدیل شده‌اند. همبستگی‌های کوانتومی مانند همدوسی کوانتومی، درهم‌تنیدگی ، ناسازگاری کوانتومی و غیره منابع فیزیکی مفید کوانتومی با کاربردهای امیدوار کننده در وظایف و پروتکل‌های پردازش و انتقال اطلاعات کوانتومی می‌باشند. مشخص شده است که درهم تنیدگی کوانتومی تمام ویژگی های ماهیت غیر کلاسیکی همبستگی‌های کوانتومی را توصیف نمی کند. در این رابطه، ناسازگاری کوانتومی به عنوان معیاری برای همبستگی‌های کوانتومی، فراتر از درهم تنیدگی، پیشنهاد شده است که می‌تواند در حالت‌های مخلوط جداپذیر نیز وجود داشته باشد[۱-٤].

ازطرفی حرکت اتمی همیشه وجود دارد و زمانی که تکانه اتم با فوتون قابل مقایسه باشد، اثر حرکت مرکز جرم مکانیک کوانتومی مهم می شود، بنابراین حرکت اتمی باید در نظر گرفته شود.

در این مقاله دینامیک ناسازگاری کوانتومی در یک سامانه کوانتومی شامل دو اتم دوترازی (کیوبیت) متحرک در داخل یک کاواک اتلافی را در دو رژیم مارکوفی و غیرمارکوفی مطالعه می‌کنیم. فرض می‌کنیم برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی بین کیوبیت‌ها وجود دارد.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

مدل بندی و معادلات اساسی

دو کیوبیت متحرک در داخل یک کاواک نشتی را در نظر می‌گیریم. فرض می‌کنیم کیوبیت‌ها در امتداد محور z کاواک با سرعت ثابت در حرکت هستند و از طریق برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی به هم جفت شده‌اند. هامیلتونی کلی سامانه تحت تقریب موج چرخان (RWA) به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$H = H_0 + H_{int} + H_{dd} \quad (۱)$$

$$H_0 = \sum_{i=1}^{2} \omega_0 \sigma_+^{(i)} \sigma_-^{(i)} + \sum_k \omega_k a_k^\dagger a_k \quad (۲)$$

$$H_{int} = \sum_{i=1}^{2} \sum_k \alpha_i g_k f_k(z) a_k \sigma_+^{(i)} + H.c. \quad (۳)$$

$$H_{dd} = D(\sigma_+^{(1)}\sigma_-^{(2)} + \sigma_-^{(1)}\sigma_+^{(2)}). \quad (۴)$$

در روابط بالا ، $\sigma_z^{(i)}$ ، $\sigma_+^{(i)}$ و $\sigma_-^{(i)}$ به ترتیب عملگرهای وارونی، بالابرنده و پایین آورنده کیوبیت i-ام با فرکانس ω_0 و $a_k(a_k^\dagger)$ عملگر فنا (خلق) مد k-ام کاواک با فرکانس ω_k می باشد. پارامتر D شدت برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی بین کیوبیت‌ها و g_k ثابت جفت‌شدگی بین کیوبیت‌ها و مد k-ام کاواک است. α_i کمیت حقیقی و بدون بعدی است که مرتبط با مکان نسبی کیوبیت i-ام می‌باشد و $f_k(z)$ تابع شکل حرکت کیوبیت‌ها در داخل کاواک را توصیف می‌کند و با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود[۵]:

$$f_k(z) \to f_k(vt) = \sin\left(\frac{pv\pi t}{L}\right) = \sin(\Phi t) \quad (۵)$$

که در آن p نشان دهنده تعداد نیم‌موج‌های مد k-ام کاواک و L طول کاواک و v سرعت کیوبیت‌ها می‌باشد.

با فرض فقط یک برانگیختگی در کل سامانه، حالت اولیه سامانه را می‌توان به شکل زیر نوشت:

$$|\psi(0)\rangle = c_1(0)|e,g\rangle|0\rangle_R + c_2(0)|g,e\rangle|0\rangle_R \quad (۶)$$

که در آن $|0\rangle_R$ حالت خلأ کاواک می‌باشد. لذا حالت کوانتومی سامانه در لحظه t به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$|\psi(t)\rangle = c_1(t)e^{-i\omega_0 t}|e,g\rangle|0\rangle_R + c_2(t)e^{-i\omega_0 t}|g,e\rangle|0\rangle_R + \sum_k c_k(t)e^{-i\omega_k t}|g,g\rangle|1_k\rangle_R \quad (۷)$$

که حالت $|1_k\rangle_R$ ، حالتی از محیط با فقط یک برانگیختگی در مد K-ام می‌باشد. می توان با رد گرفتن روی درجات آزادی محیط، ماتریس چگالی کاهیده اتمی را در پایه های $\{|e,e\rangle, |e,g\rangle, |g,e\rangle, |g,g\rangle\}$ در زمان t به دست آورد:

$$\rho(t) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & |c_1(t)|^2 & c_1(t)c_2^*(t) & 0 \\ 0 & c_1^*(t)c_2(t) & |c_2(t)|^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1-|c_1(t)|^2-|c_2(t)|^2 \end{pmatrix} \quad (۸)$$

حال با حل معادله شرودینگر وابسته به زمان، معادلات دامنه احتمال به شکل زیر به دست می‌آیند:

$$\dot{c_1}(t) = -\int_0^t dt' F(t,t')(\alpha_1{}^2 c_1(t') + \alpha_1\alpha_2 c_2(t')) - iDc_2(t) \quad (۹)$$

$$\dot{c_2}(t) = -\int_0^t dt' F(t,t')(\alpha_1\alpha_2 c_1(t') + \alpha_2{}^2 c_2(t')) - iDc_1(t) \quad (۱۰)$$

که $F(t,t')$ تابع همبستگی می‌باشد و در حد پیوسته برای محیط به صورت زیر بیان می‌شود:

$$F(t,t') = \int d\omega J(\omega) f_k(vt) f_k(vt') e^{-i(\omega-\omega_0)(t-t')} \quad (۱۱)$$

که در آن $J(\omega)$ چگالی طیفی محیط می‌باشد. با انتخاب چگالی طیفی لورنتزی:

$$J(\omega) = \frac{W^2\lambda}{\pi[(\omega-\omega_0+\delta)^2+\lambda^2]} \quad (۱۲)$$

رابطه‌ی صریح تابع همبستگی به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$F(t-t') = \frac{W^2}{2} e^{-(\lambda-i\delta)(t-t')} \cos[\Phi(t-t')] \quad (۱۳)$$

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

در اینجا δ نامیزانی بین فرکانس اتمی و فرکانس مرکزی کاواک و پارامتر λ پهنای توزیع لورنتزی را نشان می دهد که کمیت $\frac{1}{\lambda}$ زمان هم‌بستگی منبع می باشد و وزن W متناسب با فرکانس رابی خلأ است. به طور کلی دو رژیم جفت‌شدگی ضیف و قوی می‌تواند بر دینامیک سامانه اعمال شود. در رژیم جفت شدگی ضعیف ($\lambda < 2W$) زمان واهلش از زمان هم‌بستگی محیط بزرگتر است و رفتار سامانه مارکوفی است. اما در رژیم جفت شدگی قوی ($\lambda > 2W$) زمان واهلش از زمان هم‌بستگی محیط کوچکتر بوده و رفتار سامانه غیرمارکوفی است. در ادامه برای سادگی از پارامترهای بدون بعد زیر استفاده می‌کنیم: ثابت کوپلاژ جمعی $\alpha_T = \sqrt{\alpha_1^2 + \alpha_2^2}$، شدت‌های کوپلاژ نسبی $r_{1(2)} = \frac{\alpha_{1(2)}}{\alpha_T}$، و فرکانس رابی خلأ $\mathcal{R} = W\alpha_T$ که پارامتر $R = \frac{\mathcal{R}}{\lambda}$ به ما اجازه می‌دهد تا دو رژیم مارکوفی و غیرمارکوفی را به ترتیب با قیود $R \gg 1$ و $R \ll 1$ تشخیص دهیم.

با اعمال تبدیلات لاپلاس به معادلات (۹) و (۱۰)، دامنه‌های $c_1(t)$ و $c_2(t)$ بدست می‌آیند. با توجه به اینکه شکل صریح دامنه‌ها پیچیده است آن‌ها را در اینجا گزارش نمی‌دهیم.

دینامیک ناسازگاری کوانتومی

ناسازگاری کوانتومی معیاری از هم‌بستگی های غیرکلاسیکی بین دو زیر سامانه از یک سامانه مرکب کوانتومی است. به طور کلی، به علت فرآیند بهینه سازی، محاسبه تحلیلی ناسازگاری کوانتومی برای شرایط عمومی دشوار می‌باشد. با این وجود، برای برخی از حالت های X دو کیوبیتی، عبارات تحلیلی برای ناسازگاری کوانتومی شناخته شده است. برای ماتریس چگالی (۸) ناسازگاری کوانتومی را می‌توان به شکل زیر تعریف کرد[۶]:

$$QD(\rho) = \min\{QD_1, QD_2\} \qquad (۱۴)$$

که در آن

$$QD_1 = \sum_{i=1}^{4} (\lambda_i \log_2 \lambda_i - \rho_{ii} \log_2 \rho_{ii}) \qquad (۱۵)$$

$$QD_2 = H(\rho_{11} + \rho_{33}) + H(D) + \sum_{i=1}^{4} (\lambda_i \log_2 \lambda_i) \qquad (۱۶)$$

$$D = \frac{1}{2}[1 + \sqrt{(1 - 2(\rho_{33} + \rho_{44}))^2 + 4(|\rho_{14}| + |\rho_{23}|)^2}] \qquad (۱۷)$$

و

$$H(x) = -x \log_2 x - (1 - x) \log_2 (1 - x) \qquad (۱۸)$$

و λ_i ها ویژه مقادیر ماتریس چگالی (۸) می‌باشند که به صورت زیر بدست می‌آیند:

$$\lambda_1 = 1 - |c_1(t)|^2 - |c_2(t)|^2 \quad \lambda_3 = |c_1(t)|^2 + |c_2(t)|^2$$

و $\lambda_2 = \lambda_4 = 0$.

حال ما اثرات پارامترهای فیزیکی مختلف بر دینامیک ناسازگاری کوانتومی سامانه در رژیم‌های مارکوفی و غیرمارکوفی را بررسی می‌کنیم. در این مقاله ما مطالعه خود را به وضعیتی محدود می کنیم که کیوبیت ها در ابتدا در حالت بل هستند :

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e,g\rangle - |g,e\rangle) \qquad (۱۹)$$

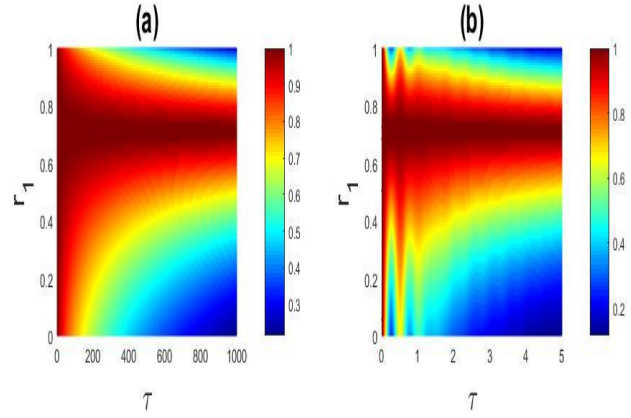
در شکل (۱) ناسازگاری کوانتومی را بر حسب زمان بدون بعد $\tau = \lambda t$ و شدت کوپلاژ نسبی r_1 در دو رژیم مارکوفی (شکل1a) وغیر مارکوفی (شکل 1b) رسم کرده‌ایم. مشاهده می‌شود که در هر دو رژیم با افزایش r_1 از صفر تا حدود ۰,۷ ناسازگاری کوانتومی برای مدت زمان طولانی‌تری باقی می‌ماند و با افزایش بیشتر r_1 از ۰,۷ این زمان کاهش می‌یابد. به ازای $r_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \approx 0.7$ ناسازگاری کوانتومی در طول زمان مقدار بیشینه خود را حفظ می‌کند که این رفتار قابل پیش‌بینی بود زیرا به ازای $r_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \approx 0.7$ حالت اولیه سامانه تبدیل به حالتی می‌شود که در طول زمان واپاشی نمی‌کند.

شکل (۲) تأثیر پارامتر Φ در رفتار ناسازگاری کوانتومی را نشان می‌دهد. همانطور که از شکل مشخص است در هر دو رژیم مارکوفی و غیرمارکوفی با افزایش مقدار Φ ناسازگاری کوانتومی برای زمان‌های طولانی‌تری حفظ می‌شود. به طور فیزیکی می‌توان

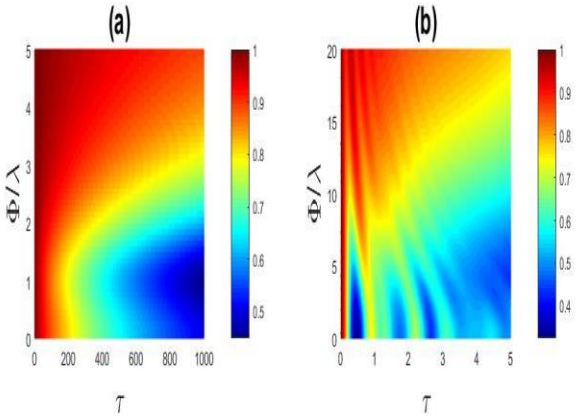
این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

اینگونه بیان کرد که سرعت کیوبیت‌ها نقش سازنده‌ای در حفظ همبستگی‌های کوانتومی سامانه دارد.

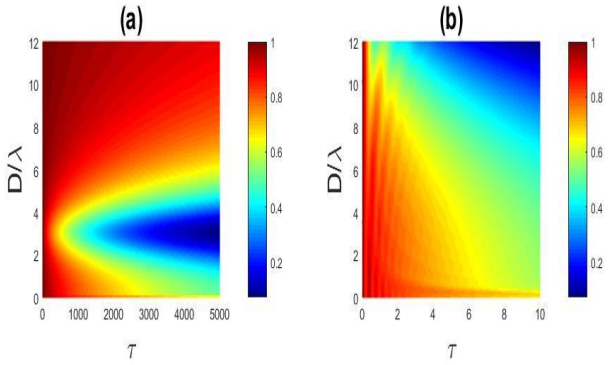
و در نهایت در شکل (۳) نمودار سه بعدی ناسازگاری کوانتومی را بر حسب τ و D رسم کرده‌ایم. با توجه به این شکل درمی‌یابیم که در رژیم مارکوفی D تأثیر متفاوتی بر دینامیک ناسازگاری دارد به طوری که با افزایش D تا حدود ۳ ناسازگاری کوانتومی سریعتر از بین می رود ولی با افزایش بیشتر D ناسازگاری کوانتومی برای مدت طولانی‌تری حفظ می‌شود. اما در رژیم غیرمارکوفی (شکل ۳b) D نقش مخرب در حفظ ناسازگاری کوانتومی دارد و با افزایش D ناسازگاری کوانتومی سریعتر از بین می‌رود.



شکل۱ : تحول زمانی ناسازگاری کوانتومی بر حسب r_1 در رژیم‌های a) مارکوفی یعنی R=0.1 به ازای $\Phi = 2\lambda$ و b) غیر مارکوفی یعنی R=10 به ازای $\Phi = 10\lambda$. سایر مقادیر عبارتند از: $D = 1\lambda$ و $\delta = 0.1\lambda$.



شکل۲ : تحول زمانی ناسازگاری کوانتومی بر حسب Φ/λ در رژیم‌های a) مارکوفی یعنی R=0.1 و b) غیر مارکوفی یعنی R=10. سایر مقادیر عبارتند از: $r_1 = \frac{1}{\sqrt{5}}$ ، $D = 1\lambda$ و $\delta = 0.1\lambda$.



شکل۳ : تحول زمانی ناسازگاری کوانتومی بر حسب D/λ در رژیم‌های a) مارکوفی یعنی R=0.1 به ازای $\Phi = 2\lambda$ و b) غیر مارکوفی یعنی R=10 به ازای $\Phi = 10\lambda$. سایر مقادیر عبارتند از: $r_1 = \frac{1}{\sqrt{5}}$ و $\delta = 0.1\lambda$.

نتیجه گیری

در این مقاله، دینامیک ناسازگاری کوانتومی در یک سامانه دو کیوبیتی با کیوبیت‌های متحرک که از طریق برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی به هم جفت شده‌اند را در داخل یک کاواک اتلافی و در دو رژیم مارکوفی و غیرمارکوفی مطالعه کردیم . با انتخاب یک حالت بل به عنوان حالت اولیه سامانه مشاهده گردید که شدت کوپلاژ نسبی r_1 ، سرعت کیوبیت‌ها Φ و شدت برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی D در حفظ ناسازگاری کوانتومی سامانه هم در رژیم مارکوفی و هم در رژیم غیرمارکوفی تأثیرات مهمی دارند.

مرجع‌ها

[۱] L. Henderson and V. Vedral, J. Phys. A 34, 6899 (2001).
[۲] H. Ollivier and W. H. Zurek, Phys. Rev. Lett. 88, 017901 (2002).
[۳] A. Ferraro et al., Phys. Rev. A 81, 052318 (2010).
[٤] A. Datta, A. Shaji and C.M. Caves, Phys. Rev. Lett. 100, 050502 (2008).
[٥] R. R. Schlicher, Opt. Commun. 70, 97 (1989).
[٦] M. Ali, A. R. P. Rau, and G. Alber, Phys. Rev. A 81, 042105 (2010).

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

دینامیک همبستگی کوانتومی حالت همدوس و چلانده دو نوسانگر واندرپل جفت شده در رژیم اتلافی

دلاوری ، سعیده[۱] ؛ عسکری، علیداد[۱] ؛ عامری، وحید[۱]

[۱]دانشکده علوم پایه دانشگاه هرمزگان ، کیلومتر ۹ جاده میناب ، بندرعباس

چکیده

در این پژوهش، اثر جفت شدگی اتلافی بر همبستگی کوانتومی بین دو نوسانگر جفت شده واندرپل، با در نظر گرفتن اثر پمپ چلانده و همدوس در سیستم کوانتومی مورد مطالعه قرار گرفته است. با بهره‌گیری از رهیافت معادله اصلی معیار درهم‌تنیدگی و اطلاعات متقابل اندازه‌گیری شد و مشاهده گردید که حالت چلانده اثر مثبت بر همبستگی کوانتومی داشته و اطلاعات متقابل که شاهدی بر وجود همبستگی هست و درهم‌تنیدگی را افزایش داده است.

واژه های کلیدی: *همبستگی کوانتومی، نوسانگر واندرپل، جفت شدگی اتلافی، درهم‌تنیدگی، اطلاعات متقابل، حالت چلانده، حالت همدوس.*

Quantum correlation dynamics of coherent states and squeeze states of two coupled Van der Pol oscillators in the dissipative regime

Delavari, Saeide[1]; Askari, Alidad[1]; Ameri, Vahid[1]

[1] Department of science, University of Hormozgan, Bandarabbas,

Abstract

In this work, the effect of dissipative coupling on quantum correlation between two Van der Pol oscillators has been studied, considering the effect of pump of coherent and squeeze in quantum system. Using the Master equation approach, entanglement and mutual information have been derived and found that the squeeze states, enhances the quantum correlation and increase the entanglement and mutual information, which is evidence of correlation.

***Keywords**: Quantum Correlation, Van der Pol Oscillators, Coupled dissipative, Entanglement, Mutual information, Squeeze states, Coherent states.*

PACS No. 30

مقدمه

یکی از بهترین نشانه‌های غیرکلاسیکی بودن در یک سیستم کوانتومی، وجود همبستگی‌هایی است که هیچ همتای کلاسیکی ندارند[۱]. همبستگی، اطلاعات یک سیستم از دیگری است و یکی از بهترین راه‌ها برای درک تفاوت‌های کلیدی بین فیزیک کوانتومی و کلاسیک را ارائه می‌دهد[۲]. فیزیکدانان همبستگی را در ابتدا معادل با درهم‌تنیدگی فرض می‌کردند و تصور می‌کردند که حالت‌های جداپذیر نقشی در انجام محاسبات کوانتومی ندارند، اما حالت‌های کوانتومی وجود دارد که درهم‌تنیده نیستند ولی می‌توانند برای انجام محاسبات کوانتومی مفید باشند[۳]. تلاش‌های بسیاری برای فهم همبستگی کوانتومی انجام گرفته‌است[۴،۵] و معیارهای مختلفی برای اندازه‌گیری آن تعریف شده که می‌توان به اطلاعات‌متقابل، درهم‌تنیدگی و ناهمخوانی کوانتومی اشاره نمود.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

نوسانگرهای واندرپل مدل ساده‌ای از یک سیستم دینامیکی غیرخطی و ناپایستار با دو نوع از حالت میرایی یعنی میرایی منفی و میرایی غیرخطی است. نوسانگر کوانتومی واندرپل به دلیل فرم ساده آن، به عنوان یک نمونه‌ی اولیه برای مطالعه مفاهیم فیزیک همگامی و همبستگی، توجه بسیاری از دانشمندان را جلب کرده، بخصوص نوسانگرهای واندرپل جفت‌شده که به‌عنوان نمونه‌ای از سیستم‌های کوانتومی جفت شده، از جنبه‌های مختلف، همگام-سازی و همبستگی را در آن‌ها مورد بررسی قرار داده‌اند.

برای مطالعه همبستگی‌ها و خواص همگامی سیستم‌های کوانتومی حداقل دو نوسانگر خودنگه‌دار که با یکدیگر جفت شده-اند، در نظر گرفته می‌شود و معادله اصلی سیستم را می‌توان با اضافه کردن سهم هر دو نوسانگر با یک اصطلاح جفت شدگی مناسب به دست آورد. اتلاف کوانتومی موضوعی است که در بسیاری از زمینه‌های علوم نوین نقش اساسی داشته و پدیده همیشه حاضر در کوانتوم می‌باشد. طی چند دهه گذشته، مطالعات در زمینه فناوری کوانتومی، عمدتاً مکانسیم‌های جفت شدگی همدوس بین زیرسیستم‌ها را مورد بررسی قرار داده‌است، اما امروزه مکانسیم‌های جفت شدگی اتلافی به‌طور گسترده در سیستم‌های کوانتومی مورد توجه قرار گرفته‌اند. جفت شدگی اتلافی در یک سیستم نقش پمپ را بازی می‌کند و باعث تزریق فوتون به سیستم می‌شود. جفت‌شدگی اتلافی بین دو نوسانگر واندرپل توسط اتلافگر $D\hat{D}[\hat{a}_1-\hat{a}_2]\rho$ توصیف می‌شود، جایی که وقتی $D>0$ جفت‌شدگی اتلافی است و هم‌فازی دو نوسانگر انتظار می‌رود، همچنین $[\hat{a}_1-\hat{a}_2]=c$ عملگر جهش یا اتلافی است و $\hat{D}[O]\rho$ موسوم به اتلافگر لیندبلاند می‌باشد[۶،۷]:

$$\hat{D}[O]\rho = O\rho O^{t} - \frac{\{O^{t}O,\rho\}}{2} \qquad (۱)$$

در این پژوهش به ترتیب: معیار درهم‌تنیدگی و اطلاعات‌متقابل را مطالعه می‌کنیم، در ادامه پس از بررسی دینامیک سیستم کوانتومی و بیان معادله اصلی سیستم، اثر جفت شدگی اتلافی بر همبستگی کوانتومی بین دو نوسانگر واندرپل در حالت چلانده و همدوس را با استفاده از نرم‌افزار شبیه‌سازی کوانتومی کیوتیپ که زیر مجموعه زبان پایتون است را مورد مطالعه قرار می‌دهیم و در انتها نتایج به-دست آمده را ارائه می‌کنیم.

درهم‌تنیدگی و اطلاعات‌متقابل

درهم‌تنیدگی یکی از جذاب‌ترین پدیده‌های طبیعت و مفهوم کاملاً کوانتومی است که معادل کلاسیک ندارد و در پدیده‌هایی مانند رمزگذاری کوانتومی، انتقال کوانتومی و محاسبات کوانتومی، که از مهم‌ترین ستون‌های نظریه اطلاعات کوانتومی هستند، نقش بسزایی دارد[۸،۹]. به زبان ساده می‌توان درهم‌تنیدگی را به معنای جفت شدن خواص مکانیکی دو ذره، ذراتی که در ابتدا با یکدیگر در تماس بوده و سپس از هم جدا شده‌اند، تعریف کرد. اگر دو سیستم یک‌بار با هم برهم‌کنش داشته باشند اگر از یکدیگر به‌فاصله زیاد هم دور شوند، اندازه‌گیری روی یکی از آن‌ها تاثیر آنی و فوری در حالت دیگری ایجاد خواهد کرد. این اندرکنش مربوط به خواص فیزیکی، مانند: مکان، تکانه، اسپین، قطبش و غیره می‌باشد، به‌گونه‌ای که با تعیین خواص فیزیکی برای یکی از دو ذره همان خاصیت در دیگری تعیین می‌شود. به‌عبارت دیگر هر یک از ذرات جفت‌شده به‌خوبی توسط حالت کوانتومی مشابه توصیف خواهد شد. مفهوم درهم‌تنیدگی کوانتومی وقتی که با حالت‌های خالص سیستم‌های دوتایی سروکار داریم، قابل درک است. یکی از معیارهای درهم‌تنیدگی، میزان آنتروپی زیرسیستم تشکیل‌دهنده‌ی آن‌ها سیستم کل است. میزان آنتروپی بین صفر تا یک است $(0\le S\le 1)$، اگر آنتروپی صفر باشد $(S=0)$، سیستم درهم‌تنیده نیست و اگر S=1 باشد، سیستم حداکثر درهم‌تنیدگی را دارد. یکی از معیارهای محاسبه درهم‌تنیدگی، لگاریتم‌منفی است که به راحتی قابل محاسبه است و به عنوان مرز بالایی برای درهم-تنیدگی قابل تفسیر است و به فرم زیر تعریف می‌شود:

$$E_N(\rho)\equiv \log\left\|\rho^{\Gamma_A}\right\|_1 \qquad (۲)$$

که در این‌جا، Γ_A عملگر انتقال جزئی و $\|0\|_1$ اصل‌رد را نشان می-دهد و به شرح زیر با منفی بودن ارتباط دارد:

$$E_N(\rho):=\log(2N+1) \qquad (۳)$$

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

اطلاعات‌متقابل کمیتی است که رابطه بین دو متغیرتصادفی که بطور همزمان نمونه برداری شده‌اند را اندازه‌گیری می‌کند[۱۰]. مفهوم اطلاعات متقابل ذاتاً با آنتروپی یک متغیرتصادفی که میزان اطلاعات موجود در یک متغیرتصادفی را نشان می‌دهد، مرتبط است و نامنفی و متقارن است. اگر دو متغیر مستقل باشند، اطلاعات‌متقابل بین آن‌ها صفر می‌باشد و اگر دو متغیر به شدت وابسته باشند، اطلاعات‌متقابل وجود دارد، به‌عنوان مثال، اطلاعات ذخیره شده در یک متغیر در متغیر دیگر و میزان پیش‌بینی متغیر دوم با شناختن اولی، واضح است که همه‌ی این تفاسیر مربوط به همان مفهوم وابستگی و همبستگی هستند[۱۰].

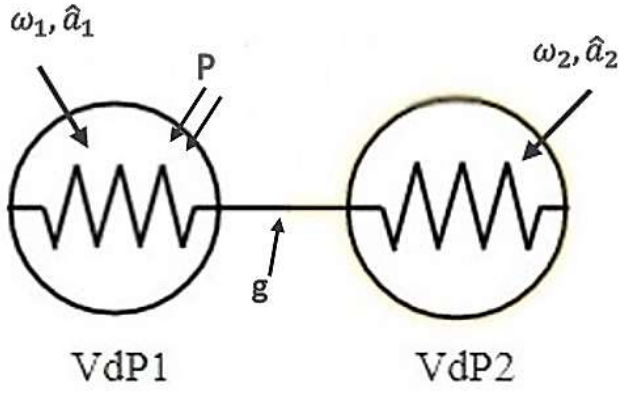
برای یک حالت کوانتومی ρ که متشکل از دو زیرسیستم با ماتریس‌های چگالی کاهش یافته $\rho_A = tr_B(\rho)$ و $\rho_B = tr_A(\rho)$ می‌باشد، اطلاعات‌متقابل کوانتومی به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$I = S(\rho_A) + S(\rho_B) - S(\rho_{AB}) \qquad (٤)$$

که آنتروپی ون‌نیومن می‌باشد. به عبارتی اطلاعات‌متقابل، اندازه‌گیری بین دو متغیرتصادفی A و B است که به طور عملیاتی مقدار اطلاعات متغیر A را در مورد متغیر B نشان می‌دهد. معادله (٤)تعمیم مستقیم این مقدار به سیستم‌های توصیف شده توسط حالت‌های کوانتومی است. مزیت این روش مبتنی بر اطلاعات این است که به سادگی می‌توان با جایگزینی آنتروپی شانون با آنتروپی ون‌نیومن، آن‌را به‌طور مستقیم به سیستم کوانتومی گسترش داد[۱۱]. اطلاعات‌متقابل کوانتومی مقدار کل همبستگی را در یک سیستم توصیف می‌کند و این مجموع را می‌توان به همبستگی‌های کلاسیک و کوانتوم تقسیم کرد.

اثر جفت شدگی اتلافی بر همبستگی کوانتومی در حالت چلانده و همدوس

یک مدل پیش نمونه از بسیاری سیستم‌های فیزیکی یک جفت نوسانگر کوانتومی است. سیستم کوانتومی ما در این پروژه، متشکل از دو نوسانگر واندرپل است که به صورت اتلافی جفت شده‌اند(شکل ۱):



شکل ۱ : **دو نوسانگر جفت شده واندرپل(a_1, ω_1 و a_2, ω_2 عملگر نابودی و فرکانس نوسانگر اول و دوم، P پمپ، g ضریب جفت شدگی)**

و از آنجایی که نوسانگرهای واندرپل مانند نوسانگرهای هارمونیک دارای طیف انرژی گسسته هستند، بنابراین هامیلتونی سیستم آزاد به‌صورت $\hat{H}_s = \sum_i^2 \hbar\omega_i \hat{a}_i^t \hat{a}_i$ می‌باشد که $\hbar=1$ ، ω فرکانس نوسانگرها و $\hat{a}^t\hat{a}$ تعداد فوتون‌ها است.

دینامیک مکانیک کوانتومی دو نوسانگر جفت شده اتلافی واندرپل را می‌توان با معادله اصلی زیر شرح داد:

$$\begin{aligned}\frac{d\rho}{dt} &= -i[\hat{H},\hat{\rho}] + \sum_i^2 \kappa(n_{th})\left(2\hat{a}_i^t\rho\hat{a}_i - \hat{a}_i\hat{a}_i^t\rho - \rho\hat{a}_i\hat{a}_i^t\right)\\ &+ \gamma(n_{th}+1)\left(2\hat{a}_i^2\rho\hat{a}_i^{t^2}{}_i - \hat{a}_i^{t^2}\hat{a}_i^2\rho - \rho\hat{a}_i^{t^2}\hat{a}_i\right)\\ &+ g\left(2\hat{c}\rho\hat{c}^t - \hat{c}^t\hat{c}\rho - \rho\hat{c}^t\hat{c}\right)\end{aligned} \qquad (٥)$$

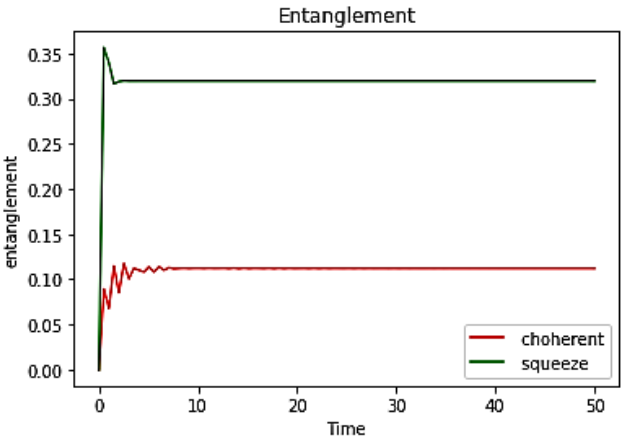
در اینجا؛ $\hat{H} = H_s + H_p$ هامیلتونی سیستم است که شامل؛ $\hat{H}_s$ هامیلتونی سیستم آزاد و $\hat{H}_p = E\left(\hat{a}_1^t + \hat{a}_1\right)$ هامیلتونی پمپ در حالت همدوس و $\hat{H}_p = E\left(\hat{a}_1^{t^2} + \hat{a}_1^2\right)$ هامیلتونی پمپ در حالت چلانده می‌باشد و $\hat{c} = \hat{a}_1 - \hat{a}_2$ اپراتور پرش است که منجر به جفت شدگی اتلافی می‌شود[۱۰،۱۱] .

همبستگی کوانتومی با در نظر گرفتن اثر جفت شدگی اتلافی توسط دانشمندان بسیاری مورد مطالعه قرار گرفته‌است و در بعضی سیستم‌ها، باعث بهبود همبستگی شده‌است. در این مقاله، ما اثر جفت شدگی اتلافی بر همبستگی کوانتومی بین دو نوسانگر جفت

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

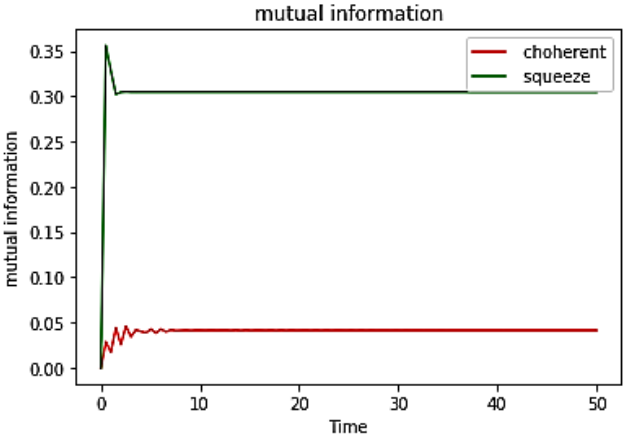
شده واندرپل را در حالت همدوس و چلانده، با استفاده از مجموعه‌ی کیوتیپ بررسی کرده‌ایم.

درهم‌تنیدگی کوانتومی به‌عنوان معیاری برای سنجش کوانتومی بودن سیستم استفاده می‌شود(شکل۲):



شکل۲: درهم تنیدگی کوانتومی دو نوسانگر جفت شده اتلافی واندرپل در حالت همدوس(نمودار قرمز) و چلانده(نمودار سبز).

و اطلاعات‌متقابل به‌عنوان معیاری برای سنجش همبستگی سیستم استفاده می‌شود و همبستگی کل سیستم را نشان می‌دهد(شکل۳):



شکل۳: اطلاعات‌متقابل دو نوسانگر جفت شده اتلافی واندرپل در حالت همدوس(نمودار قرمز) و پمپ چلانده(نمودار سبز).

و مشاهده کردیم، جفت شدگی اتلافی بر اطلاعات‌متقابل و درهم-تنیدگی کوانتومی در حالت چلانده به عنوان نور غیرکلاسیک نسبت به حالت همدوس که نزدیکترین حالت به یک حالت کلاسیک است، تاثیر مثبت داشته و افزایش یافته‌است.

نتیجه گیری

پدیده همبستگی کوانتومی و جفت شدگی اتلافی از جنبه‌های گوناگون و در سیستم‌های کوانتومی مختلف مورد بررسی قرار گرفته شده‌اند. در این پژوهش، ما اثر جفت شدگی اتلافی را در حالت همدوس و چلانده بر همبستگی کوانتومی بین دو نوسانگر جفت شده واندرپل با اندازه‌گیری معیار درهم‌تنیدگی و اطلاعات-متقابل بررسی کردیم و مشاهده کردیم که درهم‌تنیدگی و اطلاعات‌متقابل در حالت چلانده که یک حالت کوانتومی است بزرگتر از حالت همدوس است که تاثیر مثبت جفت شدگی اتلافی را بر میزان اشتراک اطلاعات و تقویت آنتروپی آن‌ها را نتیجه می-دهد.

مرجع‌ها

[۱] K.Modi; A.Brodutch; H.Cable; T.Paterek and V.Vedral; "*The classical-quantum boundary for correlations: Discord and related measures*". **Reviews of Modern Physics.** (2012) Nov 26;84(4):1655.

[۲] R.Dorner and V.Vedral; *"Correlations in quantum physics"*. **International Journal of Modern Physics B**. (2013) Jan 30;27(01n03):1345017.

[۳] K.Modi; A.Brodutch; H.Cable; T.Paterek and V.Vedral; *"Quantum discord and other measures of quantum correlation"*. ***Rev. Mod. Phys,*** (2012), 84:1655.

[٤] M.di Bernardo; F.Garofalo and F.Sorrentino; "*Effects of degree correlation on the synchronization of networks of oscillators*". **International Journal of Bifurcation and Chaos.** (2007) Oct;17(10):3499-506.

[٥] T.R.De Oliveira; *"Quantum Correlations in Multipartite Quantum Systems"*. **InLectures on General Quantum Correlations and their Applications** (2017) (pp. 87-103). **Springer, Cham.**

[٦] S.Walter; A.Nunnenkamp and C.Bruder; "*Quantum synchronization of two Van der Pol oscillators*". **Annalen der Physik**. (2015) Jan;527(1-2):131-8.

[۷] L.Morgan; and H.Hinrichsen; *"Oscillation and synchronization of two quantum van der Pol oscillators"*. **arXiv preprint arXiv**:1506.03682. (2015) Jun 11.

[۸] T.Symul; W.P.Bowen; R.Schnabel; N.Treps; B.CBuchler; T.C.Ralph; A.M.Lance; N.Grosse; A.Dolinska; J.W.Wu; and J.R.Gao; *"Optical squeezing in temporal, polarization, and spatial domains"*. **InFluctuations and Noise in Photonics and Quantum Optics** (2003) May 16 (**Vol. 5111**, pp. 67-77). **International Society for Optics and Photonics.**

[۹] M.Zukowski; "*Entanglement measures: State ordering vs. local operations*". **Quantum Communication and Security. (**2007) Jun 28;11:196.

[۱۰] W.Li; "*Mutual information functions versus correlation functions*". **Journal of statistical physics.** (1990) Sep;60(5):823-37.

[۱۱] V.Ameri; M.Eghbali-Arani; A.Mari; A.Farace; F.Kheirandish; V.Giovannetti; R.Fazio; "*Mutual information as an order parameter for quantum synchronization*". **Physical Review A**. (2015) Jan 5;91(1):012301.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

بررسی خواص توپوگرافی سطح و چگالی نوری لایه‌های نازک AZO: تهیه شده به روش کندوپاش مغناطیسی جریان مستقیم

شیراوند، مهدیه [1]؛ قبادی، نادر [2]

[1] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ملایر، ملایر

چکیده

در این مقاله لایه‌های نازک اکسید روی آلائیده با آلومینیوم (AZO) بر زیر لایه‌های شیشه‌ای به روش کندوپاش مغناطیسی جریان مستقیم لایه نشانی شده‌اند. اثر فشار گاز آرگون بر توپوگرافی سطح و چگالی نوری لایه‌های نازک AZO مورد ارزیابی قرار گرفت. توپوگرافی سطحی لایه‌ها نشان می‌دهد با افزایش فشار گاز آرگون از $1 \times 10^{-2}\ mbar$ تا $3 \times 10^{-2}\ mbar$ ، پارامتر زبری از 22.06 به 30.18 نانومتر افزایش می‌یابد که این نتیجه نشان می‌دهد با افزایش فشار گاز آرگون اندازه نانو بلورک ها افزایش یافته است، همچنین چگالی نوری لایه‌های نازک AZO تا انرژی 3 الکترون ولت ثابت، سپس این پارامتر از انرژی 3 تا 3.5 الکترون ولت دارای شیب تندی می‌شود .

واژه‌های کلیدی: ***لایه‌های نازک اکسید روی آلائیده با آلومینیوم، کندوپاش مغناطیسی جریان مستقیم، توپوگرافی سطح و چگالی نوری***

The investigation of the surface topographic properties and optical density of AZO thin films: prepared by DC magnetron sputtering

Mahdiyeh, Shiravand [1]; Ghobadi, Nader[2]

[1]*Department of Physics, Faculty of Science, Malayer university, Malayer*

ABSTRACT

In this work, Aluminum doped Zinc oxide thin films (AZO) were deposited on glass substrates by the direct current magnetron sputtering method. The influence of Ar gas pressure on the Surface topography and optical density of AZO thin films were evaluated. The surface topography indicates with increasing of Ar gas pressure from $1 \times 10^{-2}\ mbar$ to $3 \times 10^{-2}\ mbar$, the roughness parameter is increased from 22.06 to 30.18 that this result shows the size of Nano crystals are increased with enhancing of Ar gas pressure. Also, the optical density of AZO thin films up to 3 eV is constant then this parameter has a steep slope from 3 to 3.5 eV.

Keywords: *AZO thin film, direct current magnetron sputtering method, the surface topography, optical density*

مقدمه

در سال‌های اخیر، نیم‌رساناهای نانو ساختار به علت ویژگی‌های الکتریکی و نوری‌یشان در مقایسه با نمونه های توده‌ای توجه بسیار زیادی به خود جلب کرده‌اند که در این میان نیم‌رساناهای اکسید فلزی به علت سایز کوچک، ارزانی و روش ساخت ساده بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند. لایه‌های نازک اکسید روی در نیم-رساناهای ترکیبی گروه‌های II-VI طبقه‌بندی شده‌اند که از ساختار بلوری ورتزیت شش ضلعی با a=3.25 Å و c=5.12 Å تشکیل شده‌اند که در آن هر اتم روی به صورت چهاروجهی با چهار اتم اکسیژن هماهنگ شده، الکترون‌های دهنده روی با الکترون‌های پذیرنده اکسیژن ترکیب شده و لایه‌های اشغال شده به وسیله اتم روی با لایه‌های اشغال شده به وسیله اتم اکسیژن به صورت متناوب قرار گرفته اند [1-4]. در میان این مواد آلومینیوم

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

آلایش شده بر اکسید روی (AZO) به علت ویژگی‌های جالبشان شامل مقاومت ویژه پایین ($10^{-4}\ \Omega\ cm$)، عبور نوری بالا در ناحیه مرئی، رسانندگی الکتریکی بالا، پایداری شیمیایی ،مکانیکی و گرمایی، گاف نواری وسیع مستقیم در دمای اتاق بسیار شناخته شده‌اند. همچنین، سایز یونی Al^{3+} (0.57 Å) کوچکتر از سایز یونی Zn^{2+} (0.72 Å) می‌باشد و کرنش‌های شبکه‌ای ناشی از آلایش کردن را به حداقل می‌رساند [5, 6]. به منظور به دست آوردن لایه‌های نازک آلومینیوم *آلائیده* شده بر اکسید روی، روش-های لایه‌نشانی متنوعی مانند کندوپاش مغناطیسی جریان مستقیم، رسوب دهی حمام شیمیای، سل ژل، و ...وجود دارند. در کار حاضر، لایه‌های نازک AZO با تغییر فشار گاز آرگون به روش کندوپاش مغناطیسی جریان مستقیم تهیه شده‌اند، این روش به علت انعطاف پذیری و توانایی برای لایه نشانی لایه‌ها تحت خلا، کنترل بر ترکیب لایه‌ها، استوکیومتری و چسبندگی خوب انتخاب شده است. دراین مقاله توپوگرافی سطحی و چگالی اپتیکی لایه های نازک AZO با تغییر فشار گاز آرگون مورد آنالیز قرار گرفته است[7-9].

روش آزمایشگاهی

لایه‌های نازک آلومینیوم آلائیده شده بر اکسید روی به روش کندوپاش مغناطیسی جریان مستقیم تهیه شده‌اند. یک دیسک AZO باخلوص99 درصد با قطر 100 نانومتر به عنوان کاتد استفاده شد. همه لایه‌های نازک AZO با شرایط یکسانی شامل جریان ورودی 175 میلی‌آمپر و ولتاژ ورودی 300 ولت لایه نشانی شدند. ابتدا زیرلایه‌های شیشه‌ای برای از بین بردن ذرات چسبیده به سطح‌شان در حمام اولتراسونیک به وسیله استون و اتانوال به مدت 20 دقیقه تمیز شدند، سپس در آب دیونیزه شسته شده و درهوای داغ و فشار بالا خشک شدند، زیرلایه ها در محفظه قرار گرفتند و محفظه به وسیله پمپ‌های روتاری و توربو تا فشار $2.8 \times 10^{-5}\ mbar$ خلأ شد سپس فشار محفظه با گاز آرگون با خلوص 99 درصد افزایش یافت. در کار حاضر لایه‌های نازک AZO در فشارهای $3 \times 10^{-2}\ mbar$ ،$2 \times 10^{-2}\ mbar$ ،$1 \times 10^{-2}\ mbar$ لایه‌نشانی شدند.

نتایج و بحث

الف: تعریف و محاسبه پارامترهای آماری زبری سطح

از نظر ریاضی یک سطح زبر را می‌توان توسط خصوصیات آماری آن از طریق تابع h(r) توصیف نمود. تابع h(r) به گونه‌ای است که بتواند میزان انحراف از یک سطح مرجع را در هر نقطه r مشخص نماید. بنابراین h(r) ارتفاع نقاط سطح زبر و r بردار موقعیت سطح می‌باشد. توجه شود که هر نقطه روی سطح دو بعدی از طریق دو متغیر مکانی x و y مشخص می‌شود.. ارتفاع میانگین سطح، تابعی تک مقدار از بردار موقعیت r است. زبری سطح پارامتر تصادفی است که برای توصیف میدان تصادفی، تابع توزیع مشترک n بعدی از $p_n(h_1, h_2, \ldots h_n; r_1, r_2, \ldots r_n)$ که $r_1, r_2, r_3 \ldots r_n$ مجموعه‌ای از موقعیت‌های مختلف روی سطح و $h_1, h_2, h_3 \ldots h_n$ متغیرهای تصادفی متناظر هستند.

پارامتر میانگین حسابی ارتفاع، پارامتر جهانی زبری بوده و برای کنترل کیفیت عمومی سطح، مورد استفاده قرار می‌گیرد.

$$R_a = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}[h_i] \qquad (1)$$

زبری RMS انحراف استاندارد توزیع ارتفاع سطح را نشان می‌دهد که نسبت به میانگین ارتفاع حسابی R_a، حساسیت بیشتری دارد.

$$R_q = \frac{1}{n}\sqrt{\sum_{i,j=1}^{n}(h_{(i,j)} - < h_{(i,j)} >)^2} \qquad (2)$$

چولگی یک پروفایل، سومین مومنت مرکزی از تابع توزیع چگالی احتمال دامنه پروفایل است، چولگی پروفایل‌هایی با دره‌های عمیق منفی و پروفایل‌هایی با قله‌های بلند مثبت هستند.

$$R_{sk} = \frac{1}{N<R_q>^3}\sum_{i,j=1}^{n}(h_{(i,j)} - < h >_N)^3 \qquad (3)$$

و R_{ku}، پارامتر کشیدگی می‌باشد ،که میزان هم‌خوانی قله منحنی یک توزیع آماری را نسبت به توزیع نرمال، مشخص می‌کند. اگر $R_{ku}<3$ باشد توزیع پلاتی کورتیک بوده و ارتفاع آن کمتر از

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

توزیع نرمال، اگر $R_{ku}>3$ باشد توزیع لیپتوکورتیک است که ارتفاع آن از توزیع نرمال بیشتر بوده و اگر $R_{ku}=3$ باشد توزیع میزو کورتیک، که همان توزیع نرمال را نشان می‌دهد.[10, 11]

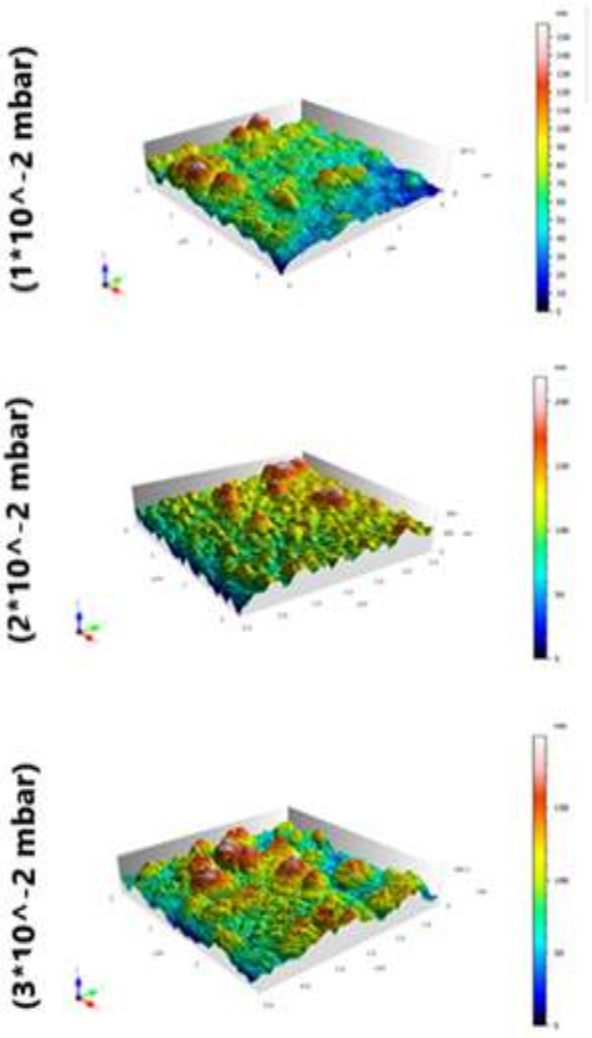
$$R_{ku} = \frac{1}{N<R_q>^4}\sum_{i,j=1}^{n}(h_{(i,j)} - < h >_N)^4 \qquad (4)$$

شکل 1 تصاویر سه بعدی میکروسکپ نیروی اتمی، از سطح لایه های نازک AZO را با تغییر فشار گاز آرگون نشان می‌دهد، این شکل نشان می‌دهد که با افزایش فشار آرگون از $1\times10^{-2}\,mbar$ تا $3\times10^{-2}\,mbar$، پارامتر زبری از 22.06 به 30.18 نانومتر افزایش می‌یابد که این نتیجه نشان می-دهد با افزایش فشار گاز آرگون اندازه نانو بلورک‌ها افزایش یافته و لایه‌ها زبرتر شده‌اند (از آنجائیکه با افزایش فشار گاز آرگون انرژی دریافتی ذرات در سطح کاهش می‌یابد و به دلیل برخورد با اتم‌های بیشتر، انرژی کمتری برای انتشار در سطح باقی می‌ماند) [12].

مطابق شکل 1، اندازه سطح همه نمونه‌ها 1μm×1μm بوده و ارتفاع ماکزیمم سطح نمونه ها، به ترتیب با افزایش فشار گاز آرگون از $1\times10^{-2}\,mbar$ به $3\times10^{-2}\,mbar$ ، 157.2، 219 و199.2 نانومتر می‌باشند که این پارامتر نشان می-دهد لایه AZO که تحت فشار $2\times10^{-2}\,mbar$ تهیه شده است دارای ارتفاع ماکزیمم سطح بیشتر، بنابراین دارای بی‌نظمی بیشتری می‌باشد، نتایج در جدول 1 بیان شده‌اند [13-15]

جدول 1: مقادیر پارامترهای توپوگرافی سطح لایه‌های نازک AZO با تغییر فشار گاز آرگون از $1\times10^{-2}\,mbar$ به $3\times10^{-2}\,mbar$

AFM analysis					
Ar gas pressure (10^{-2}mbar)	**S_q (nm)**	**S_{sk}**	**S_{ku}**	**S_z (nm)**	**S_a (nm)**
1	22.06	0.4563	4.064	157.2	16.33
2	27.83	0.6032	4.324	219	20.63
3	30.18	0.3925	2.955	199.2	24.02



شکل 1: تصاویر سه بعدی از سطح لایه‌های نازک AZO با تغییر فشار گاز آرگون از $1\times10^{-2}\,mbar$ به $3\times10^{-2}\,mbar$

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.

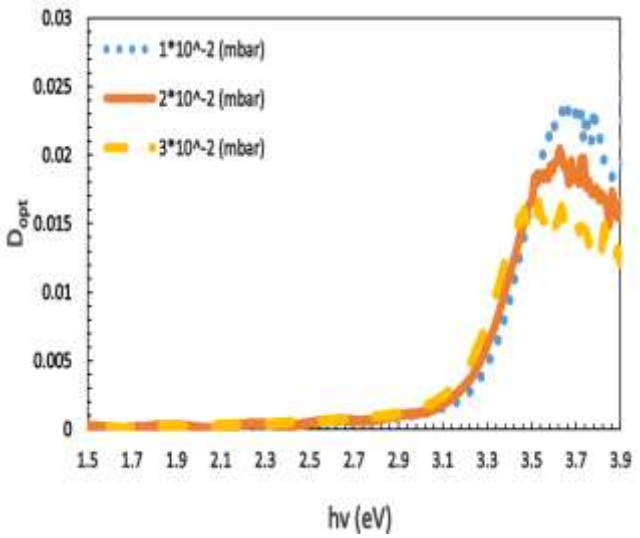
ب: بررسی چگالی نوری لایه‌ها

چگالی نوری لایه‌ها یک بیان کمی از نوری است که به وسیله مواد جذب شده است و تخمین چگالی نوری یک روش متداول برای کمی کردن پارامترهای مهم متنوع مانند غلظت لایه‌ها و تغییر در مورفولوژی لایه ها می‌باشد و از رابطه زیر محاسبه می‌شود: [16]

$$D_{opt} = \alpha \, t \qquad (5)$$

که در رابطه بالا α ضریب جذب و t، ضخامت لایه‌ها می‌باشد.[16]

شکل 2 چگالی نوری لایه‌ها را نسبت به انرژی فوتون فرودی نشان می‌دهد. چگالی نوری لایه‌ها با افزایش فشار گاز آرگون از $1 \times 10^{-2}\ mbar$ به $3 \times 10^{-2}\ mbar$ تا انرژی 3 الکترون ولت ثابت، از 3 تا 3.5 الکترون ولت با شیب تندی افزایش می‌یابد که گاف انرژی را برای لایه‌ها بین 3 تا 3.5 الکترون ولت پیش‌بینی می‌کند و نشان می‌دهد با افزایش فشار گاز آرگون، اندازه نانو بلورک‌ها و ضخامت لایه‌ها افزایش یافته، بنابراین چگالی نوری لایه ها کاهش یافته است.



شکل 2: نمودار چگالی نوری بر حسب انرژی فوتون فرودی لایه‌های نازک AZO با تغییر فشار گاز آرگون از $1 \times 10^{-2}\ mbar$ به $3 \times 10^{-2}\ mbar$

نتیجه‌گیری

لایه‌های نازک AZO روی زیرلایه‌های شیشه‌ای به روش کندوپاش مغناطیسی جریان مستقیم تهیه شدند و آنالیز AFM برای توصیف توپوگرافی سطح لایه‌ها انجام شد. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش فشار گاز آرگون پارامتر زبری لایه‌ها افزایش یافته است و نتایج شواهدی را ارائه می‌دهد که میزان فشار گاز آرگون تا حد زیادی بر مورفولوژی سطح و اندازه نانوبلورک‌ها تاثیر می‌گذارد که با این روش لایه نشانی می‌توان به لایه‌های نازک AZO با ضخامت و میزان زبری مناسب دست یافت.

مرجع‌ها

[1] T. K. Subramanyam, P. Goutham, S. Pavan Kumar, S. R. Yadhuraj, K S. Geetha; Materials Today **5** (2018) 10851-10859.
[2] K. E. Lee, M. Wang, E. J. Kim, S. H. Hahn; Current Applied Physics **9** (2009) 683-687.
[3] S. Pat, R. Mohammadigharehbagh, S. Ozen,V. Senay, H. Hakan Yudar, S. Korkmaz; Vacuum **141** (2017) 210-215.
[4] S. Rahmane, M. A. Djouadi, M. S. Aida, N. Barreau, B. Abdallah, N. Hadj Zoubir; Thin Solid Films **519** (2010) 5-10.
[5] N.Evcimen Duygulu, A.O.Kodolbas, A.Ekerim; Journal of Crystal Growth **394** (2014) 116-125.
[6] M. Saravanakumar, S. Agilan, N. Muthukumarasamy; Int J Chem Tech Res **6** (2014) 2941-5.
[7] B. Sarma, D. Barman, B. K. Sarma; Applied Surface Science **479** (2019)786-795.
[8] L.Wen, B. B. Sahu, H. R. Kim, J. G. Han; Applied Surface Science **473** (2019) 649-656.
[9] M. R. Islam, M. Rahman, S. F. U. Farhad, J. Podder; Surfaces and Interfaces **16** (2019)120-126.
[10] M. Mirzaee, A. Zendehnam, S. Miri; Scientia Iranica **20** (2013) 1071-1075
[11] K. K. Manesh, B. Ramamoorthy, M. Singaperumal; Wear **268** (2010) 1371-1379
[12] D. K. Kim, H. B. Kim; Journal of Alloys and Compounds **509** (2011) 421-425
[13] Ş. Ţălu, C. Luna, A. Ahmadpourian, A. Achour, A. Arman, S. Naderi, N. Ghobadi, S. Stach, B. Safibonab; Journal of Materials Science: Materials in Electronics **27** (2019) 11425-1143.
[14] M. Molamohammadi, A. Arman, A. Achour and et al; J. Mater. Sci.: Mater. Electron **26** (2015)5964-5969.
[15] M. Molamohammadi, C. Luna, A. Arman and et al; J. Mater. Sci.: Mater. Electron **26** (2015) 6814-6818.
[16] N. Rahimi, V. Dalouji and A. Souri; Advanced Ceramics Progress, **2** (2020)17-23.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در تارنمای انجمن فیزیک ایران به آدرس https://www.psi.ir/f/physics1401 معتبر است.